

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

RODRIGO BRANCO RODAKOVSKI

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DO TRANSPORTE TURBULENTO DE
ESCALARES EM CONVECÇÃO DE RAYLEIGH-BÉNARD

CURITIBA

2019

RODRIGO BRANCO RODAKOVSKI

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DO TRANSPORTE TURBULENTO DE
ESCALARES EM CONVECÇÃO DE RAYLEIGH-BÉNARD

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Ambiental do Setor de Tecnologia da
Universidade Federal do Paraná como requisito parcial
para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Am-
biental.

Orientador: Prof. Nelson Luís da Costa Dias

CURITIBA

2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

R685s

Rodakoviski, Rodrigo Branco

Simulação numérica direta do transporte turbulento de escalares em convecção de Rayleigh-Bénard [recurso eletrônico] / Rodrigo Branco Rodakoviski. – Curitiba, 2019.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, 2019.

Orientador: Nelson Luís da Costa Dias .

1. Teoria de campos escalares. 2. Rayleigh-Bénard, Convenção de. 3. Lorenz, Equações de. I. Universidade Federal do Paraná. II. Dias, Nelson Luís da Costa. III. Título.

CDD: 530.11

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894

TERMO DE APROVAÇÃO


Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **RODRIGO BRANCO RODAKOVISKI**, intitulada: **SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DO TRANSPORTE TURBULENTO DE ESCALARES EM CONVECÇÃO DE RAYLEIGH-BÉNARD**, após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de Mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 20 de Maio de 2019.

NLDm

NELSON LUÍS DA COSTA DIAS
Presidente da Banca Examinadora


MAURÍCIO FELGA GOBBI
Avaliador Interno (UFPR)

Defesa à distância
NLDm
MARCELO CHAMECKI
Avaliador Externo (UCLA)

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, o professor Nelson Luís Dias, com quem sempre pude contar desde que começamos a trabalhar juntos há alguns anos atrás. Além disso, agradeço aos professores Marcelo Chamecki e Maurício Gobbi por aceitarem o convite para compor a minha banca, e pelas suas várias contribuições a este (não tão breve) texto.

Obrigado a todos os professores e todas as professoras que já contribuíram para esta pesquisa de alguma maneira: Ailin Ruiz de Zárate, Lívia Freire, Elie Bou-Zeid, Ricardo Almeida, Michael Mannich, Cynara Cunha... Vocês são fontes de inspiração, por quem tenho grande admiração.

Agradeço aos amigos que fiz durante o mestrado, que me acompanharam durante disciplinas, saídas de campo, seminários, congressos, vários cafés da tarde e (uma ou duas) festas. Foi um período de grande crescimento profissional e pessoal, e sou grato por tê-los tido próximos.

Também digo obrigado à minha família (o que inclui os cães e gatos — a vida seria muito entediante sem eles), pelo apoio e pela confiança depositada em mim.

Acredito na importância do investimento público na pesquisa de base para o desenvolvimento da humanidade e de uma nação. Por esta razão, agradeço à CAPES pela concessão da bolsa de estudos que viabilizou o meu mestrado.

*“isso de querer
ser exatamente aquilo
que a gente é
ainda vai
nos levar além”*

Paulo Leminski

RESUMO

Com o objetivo de avaliar o efeito das difusividades moleculares sobre a similaridade entre escalares, este estudo utilizou um método de diferenças finitas de quarta ordem baseado em [Liu et al. \(2003\)](#) para simular diretamente convecção de Rayleigh-Bénard bidimensional. Adotou-se uma geometria retangular com razão de aspecto $\Gamma = 5$ e número de Prandtl $Pr = 10$. O maior número de Rayleigh simulado foi $Ra = 10^7$. Aplicou-se condições de contorno periódicas na direção horizontal e condições de tensão nula sobre as placas, de maneira similar ao que foi feito por [Lorenz \(1963\)](#). Enquanto os regimes de escoamento identificados conforme variou-se Ra equiparam-se relativamente bem com os observados experimentalmente ([Busse, 1978](#)), as leis de potência obtidas para os números de Nusselt e Reynolds em função de Ra e Pr apresentaram diferenças importantes em relação à teoria de [Grossmann e Lohse \(2000\)](#). Foram observados vários resultados clássicos em turbulência, tais como a homogeneização de propriedades do escoamento, a energia cinética da turbulência sendo dissipada a uma taxa muito maior que a energia cinética do escoamento médio, e espectros cujas faixas de dissipação ocorrem até as frequências associadas às microescalas, calculadas numericamente. Incluiu-se no escoamento um escalar passivo com número de Lewis Le variando entre 0,1 e 10, o qual foi comparado à temperatura. Quando tais escalares possuem a mesma difusividade molecular, suas séries temporais tornam-se idênticas, mesmo partindo de condições iniciais distintas, o que sugere que os seus papéis de ativo/passivo no escoamento não afetam a sua similaridade. Por outro lado, quando Le se afasta da unidade, a correlação entre os escalares decai, de maneira que o escalar com maior difusividade molecular possui também a maior difusividade turbulenta (o que também é previsto pelas equações de Lorenz). Este resultado é especialmente importante em escoamentos em que o número de Reynolds não é tão elevado e, se verificado também para convecção tridimensional, deve ser incorporado por modelos de dispersão aplicados a poluentes de difusividades moleculares muito diferentes.

Palavras-chave: Convecção de Rayleigh-Bénard. Simulação numérica direta. Equações de Lorenz. Similaridade entre escalares.

ABSTRACT

In order to evaluate the effect of the molecular diffusivities of scalars on their similarity, this study employed a fourth order finite difference method based on [Liu et al. \(2003\)](#) to directly simulate two-dimensional Rayleigh-Bénard convection. We adopted a rectangular geometry with aspect ratio $\Gamma = 5$ and Prandtl number $Pr = 10$. The largest Rayleigh number simulated was $Ra = 10^7$. We applied periodic boundary conditions in the horizontal direction, and stress-free conditions at the plates, in the same manner as [Lorenz \(1963\)](#). Whereas the flow regimes identified for varying Ra matched relatively well those observed in experiments ([Busse, 1978](#)), the power laws we obtained for the Nusselt and Reynolds numbers as functions of Ra e Pr are quite different from those given by [Grossmann e Lohse \(2000\)](#). Several classical results in turbulence theory were observed, such as the mixing property of turbulent flows, a much greater turbulence kinetic energy dissipation rate than the corresponding mean value, and spectra whose dissipation ranges end nearly at the frequencies associated with the microscales, which were numerically computed. A passive scalar of Lewis number Le varying between 0,1 and 10 was included within the flow, and was compared to temperature. When such scalars possess the same molecular diffusivity, their time series become identical despite departing from different initial conditions, a result that suggests that their active/passive roles do not affect their similarity. On the other hand, as Le deviates from unity, the correlation between them decreases, so that the scalar having the greatest molecular diffusivity has the greatest eddy diffusivity as well. This result, also predicted by the Lorenz equations, is particularly important in moderate Reynolds number flows. Future research should verify if it holds for three-dimensional convection and, if it does, the effect of the Lewis number should be accounted for in dispersion models, especially when applied to pollutants of fairly distinct molecular diffusivities.

Keywords: Rayleigh-Bénard convection. Direct numerical simulation. Lorenz equations. Similarity between scalars.

Prefácio

Neste texto, quaisquer palavras em idiomas diferentes do português foram escritas em itálico, como, por exemplo, *direct numerical simulation*. Contudo, expressões em latim, tais como *et al.* ou *ad hoc*, foram mantidas em tipo romano, por considerar-se que as mesmas já foram incorporadas à língua portuguesa.

Abreviações em português foram utilizadas somente quando já consagradas: por exemplo, EDO para equação diferencial ordinária. Abreviações em inglês foram utilizadas nos demais casos: por exemplo, DNS para simulação numérica direta, ao invés de SND.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. Este texto foi redigido em \LaTeX 2_ε.

Sumário

1	Introdução	26
1.1	O transporte de escalares em escoamentos naturais	26
1.2	Convecção de Rayleigh-Bénard	27
1.3	Por que DNS?	28
1.4	Justificativa e objetivos	30
2	Revisão bibliográfica	32
2.1	Simulações numéricas diretas	32
2.1.1	Histórico	32
2.1.2	Aplicações	33
2.1.3	Métodos numéricos	34
2.2	Convecção de Rayleigh-Bénard	35
2.2.1	Primeiros estudos	35
2.2.2	Relação com as equações de Lorenz	36
2.2.3	Desenvolvimentos recentes	37
2.3	Similaridade entre escalares	38
3	Formulação matemática	40
3.1	Princípios fundamentais	40
3.1.1	Conservação da massa	40
3.1.2	Conservação da quantidade de movimento	41
3.1.3	Energia cinética do escoamento	42
3.1.4	Conservação da energia	43
3.1.5	Conservação da massa de um soluto	44
3.2	Equações de Boussinesq	44
3.2.1	O estado de referência	44
3.2.2	A aproximação de Boussinesq	45
3.2.3	Adimensionalização das equações	47
3.2.4	Formulação vorticidade–função corrente	51
3.3	Condições inicial e de contorno	51
3.3.1	Condições de contorno	51
3.3.2	Perturbação inicial e estabilidade térmica	52
3.4	Equações de Lorenz	54
3.4.1	Expansão em séries de Fourier	55
3.4.2	Seleção de modos	55
3.5	Equações para o escoamento médio	58
3.5.1	Fluxos turbulentos	58
3.5.2	Energia cinética e taxa de dissipação médias	59

3.6	Microescalas da turbulência	61
3.6.1	Microescalas de Kolmogorov	61
3.6.2	Microescalas do escalar passivo	63
3.7	Análises espectrais	64
4	Métodos numéricos	67
4.1	Considerações iniciais	67
4.2	Discretização das derivadas espaciais	68
4.2.1	Equação da temperatura	68
4.2.2	Equação do escalar passivo	70
4.2.3	Equação da vorticidade	70
4.2.4	Campo de velocidades	72
4.3	Solução da equação de Poisson	73
4.3.1	Métodos iterativos	73
4.3.2	Solução direta usando FFT	74
4.3.3	Demonstração do método	76
4.4	Discretização das derivadas temporais	78
4.5	Crítérios de execução do algoritmo	80
4.5.1	Estabilidade numérica	80
4.5.2	Razão de aspecto	81
4.5.3	Representação das microescalas	83
4.5.4	Camadas-limite	85
4.5.5	Resumo	86
5	Resultados sobre a dinâmica do escoamento	89
5.1	Análise qualitativa dos regimes de escoamento	89
5.1.1	Situação estática	89
5.1.2	Convecção estacionária	90
5.1.3	Regime oscilatório	92
5.1.4	Regime turbulento	95
5.2	Estatísticas globais	105
5.2.1	Número de Nusselt	108
5.2.2	Número de Reynolds	113
5.2.3	Taxa de dissipação da energia cinética	115
5.3	Outras medidas	121
5.3.1	Espectros	121
5.3.2	Espaços de fase	130
5.3.3	Funções de autocorrelação	130
5.3.4	Taxas de dissipação e microescalas	132
5.4	Equações de Lorenz	140
5.4.1	Soluções estacionárias e não-periódicas	140
5.4.2	Número de Nusselt	143
6	Similaridade entre escalares	145
6.1	Coeficiente de correlação	148
6.2	Difusividade turbulenta	151
6.3	Número de Nusselt	155
6.4	Outras medidas	156
6.4.1	Coeficientes de correlação espectral	156

6.4.2	Espaços de fase	156
6.4.3	Funções de autocorrelação	159
6.5	Equações de Lorenz	159
7	Considerações finais e recomendações	165
8	Referências Bibliográficas	168

Lista de Tabelas

2.1	Valores máximos do número de Rayleigh atingidos em DNS de RBC (Ahlers et al., 2009).	38
3.1	Parâmetros adimensionais importantes em RBC com inclusão de um escalar passivo. Todos os parâmetros (com exceção dos dois últimos, referentes à implementação numérica) devem ser função dos quatro primeiros, independentes.	50
4.1	Resoluções espacial (em termos de $N_z = h^{-1}$) e temporal necessárias (considerando $\chi_\theta = 4$, $Le \geq 1$ e $\Gamma = 5$) para diferentes números de Rayleigh. O tempo de processamento refere-se a uma simulação de duração adimensional unitária executada em um computador com quatro processadores Intel Core i7 na Universidade Federal do Paraná.	88
5.1	Número m de pares de estruturas convectivas formadas em diferentes simulações numéricas. Para cada valor de Ra, foram realizados 7 testes com diferentes condições iniciais (aleatórias).	97

Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática do domínio do problema de Rayleigh-Bénard, em que duas placas infinitas na direção x e afastadas de uma distância H na direção vertical z são mantidas a uma diferença de temperatura $\Delta\Theta$, sendo Θ_0 a temperatura da placa inferior. A reta em vermelho representa o perfil linear de temperatura na situação estática.	28
1.2	Função arbitrária (em azul) ilustrando fenômeno unidimensional. A malha utilizada em DNS (em cinza), capaz de resolver todos os fenômenos, possui espessura bastante inferior àquela da malha de LES (em preto), que por sua vez resolve apenas os fenômenos de maior escala, exigindo parametrização dos fenômenos de escala inferior à espessura da grade.	29
1.3	Estruturas das moléculas de dióxido de carbono (à esquerda) e de nitrato de peroxiacetila (à direita).	30
2.1	Representação esquemática das estruturas observadas por Bénard (1900) e traduções da nomenclatura originalmente utilizada pelo autor.	36
3.1	Corpo material $\mathcal{C}(t)$ delimitado pela superfície material $\mathcal{S}(t)$ em um escoamento. Um elemento de volume em \mathcal{C} é dV , enquanto um elemento de área em \mathcal{S} é dA . O vetor unitário normal a \mathcal{S} apontando para fora de \mathcal{C} é \hat{n}	41
3.2	Valores críticos do número de Rayleigh (aqueles que instabilizam a solução hidrostática) em função dos números de onda das perturbações impostas.	54
3.3	A energia cinética associada à velocidade média é pouco dissipada em energia interna e principalmente utilizada para produção de TKE, que por sua vez é dissipada em energia interna a uma taxa elevada devido à intensidade dos gradientes de velocidade na microescala. Em RBC, entretanto, a principal fonte de TKE é a energia potencial.	61
3.4	Espectros hipotéticos com inclinações previstas teoricamente para turbulência tridimensional segundo Batchelor (1959) e Batchelor et al. (1959).	66
4.1	Função arbitrária atendendo a condições de contorno periódicas. O domínio computacional, subconjunto do domínio físico infinito em x , pode ser visto como a superfície de um cilindro em que as posições $i = 0$ e $i = N_x$ são equivalentes.	69
4.2	Para estimar o laplaciano de uma função nos pontos em cinza com acurácia de quarta ordem, uma aproximação do tipo <i>long-stencil</i> utiliza o esquema à esquerda, enquanto um esquema compacto, representado à direita, combina as estimativas obtidas utilizando os pontos vermelhos e verdes separadamente. . .	71

4.3	Um esquema explícito de segunda ordem usa as retas azul e violeta, de inclinações iguais à derivada da função a ser estimada (curva tracejada em vermelho) no início e no final do intervalo de largura Δt , respectivamente, para estimar $\theta(t)$ no instante de tempo seguinte.	79
4.4	Função de autocorrelação hipotética ϱ (em azul) em função da separação Δx na direção horizontal, ilustrando a periodicidade do domínio e uma razão de aspecto grande o suficiente para que ϱ tenda a zero.	83
4.5	Espessura h da malha numérica (em vermelho) e $\chi_\theta = 4$ vezes a microescala de temperatura (em preto) em função do número de Rayleigh.	86
4.6	Espessura da malha necessária (dada em termos de $N_z = h^{-1}$ pelas cores) em função de Ra e $Le < 1$, situação em que a microescala do escalar passivo é inferior à da temperatura.	87
4.7	Tempo de processamento estimado (considerando $\chi_\theta = 4$, $Le \geq 1$ e $\Gamma = 5$) para simular um escoamento de duração adimensional unitária em um computador com quatro processadores Intel Core i7 na Universidade Federal do Paraná. . .	88
5.1	Campo de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ em regime permanente para $Ra < Ra_c$ (situação estática).	90
5.2	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 6 \times 10^2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis na situação estática.	91
5.3	Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) em regime permanente, respectivamente (de cima para baixo) para $Ra = 7 \times 10^2$, $Ra = 1 \times 10^3$, $Ra = 4 \times 10^3$, $Ra = 8 \times 10^3$ e $Ra = 2 \times 10^4$, determinados via DNS. Os módulos dos vetores que aparecem nas figuras foram normalizados por diferentes fatores de forma a apresentar tamanhos semelhantes, muito embora a velocidade do escoamento aumente conforme aumenta-se Ra	93
5.4	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 4 \times 10^3$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em convecção estacionária.	94
5.5	Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) em regime oscilatório para $Ra = 4 \times 10^4$, determinados via DNS, para os instantes $t^* = 19,890$ (acima) e $t^* = 19,940$ (abaixo), ilustrando dois estados extremos (aproximadamente) entre os quais oscila o escoamento.	95
5.6	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 4 \times 10^4$ e $m = 2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime oscilatório.	96
5.7	Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) instantâneos em regime turbulento, respectivamente para $Ra = 8 \times 10^4$ e $Ra = 2 \times 10^5$, em escoamentos com $m = 2$, obtidos via DNS.	97
5.8	Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) instantâneos em regime turbulento, respectivamente para $Ra = 8 \times 10^4$, $Ra = 2 \times 10^5$, $Ra = 1 \times 10^6$ e $Ra = 1 \times 10^7$, em escoamentos com $m = 1$, obtidos via DNS.	98
5.9	Cenas de um escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$, igualmente espaçadas entre os instantes $t^* = 13,07$ e $t^* = 13,27$, em que dois pares de células convectivas se colapsaram, dando origem a um único par. As cores representam a temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$, enquanto os vetores indicam o campo de velocidades.	100

5.10	Perfis instantâneos de temperatura em diferentes posições x^* do escoamento com $Ra = 1 \times 10^7$ ilustrado na figura 5.8. A curva em verde representa o perfil típico que ocorre na maior parte do escoamento. A curva em azul corresponde aproximadamente à posição da corrente de subsidência, enquanto a curva em vermelho corresponde à posição da corrente ascendente. Também observa-se a variação da espessura das camadas-limite térmicas com x^*	101
5.11	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime turbulento.	102
5.12	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 1 \times 10^6$ e $m = 1$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime turbulento.	103
5.13	Cenas do período transiente de um escoamento com $Ra = 1 \times 10^7$, igualmente espaçadas entre os instantes $t^* = 0,0012$ e $t^* = 0,0017$. As cores representam a temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$, enquanto os vetores indicam o campo de velocidades. .	104
5.14	Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 2$, ilustrando situação atípica em que a periodicidade se manifesta de uma maneira que não foi observada para os valores menores de Ra testados ou $m = 1$	106
5.15	Resumo dos diferentes regimes de escoamento em função de Ra para $Pr = 10$ segundo (a) Busse (1978), (b) o DNS desenvolvido no presente trabalho, e (c) Lorenz (1963) (a escala do eixo horizontal é a mesma nos três casos).	107
5.16	Fluxos de calor por condução (em vermelho), advecção total (média e turbulenta, em verde) e número de Nusselt em função da coordenada vertical (em azul) calculados numericamente para um escoamento com $Ra = 2 \times 10^4$ obtido via DNS.	110
5.17	Valores de Nu_θ obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra , (b) em termos da razão entre eles em função de Ra , e (c) em um diagrama de dispersão.	111
5.18	Valores de Re obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra , (b) em termos da razão entre eles em função de Ra , e (c) em um diagrama de dispersão.	114
5.19	Campos instantâneos da taxa de dissipação total da energia cinética ($\epsilon_M^* + \epsilon^*$, acima) e de temperatura adimensional ($\Theta^* - \Theta_0^*$, abaixo) de um escoamento com $Ra = 2 \times 10^4$	117
5.20	Valores de $\epsilon_M^* + \epsilon^*$ obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra , (b) em termos da razão entre eles em função de Ra , e (c) em um diagrama de dispersão. Para o cálculo dos valores teóricos, utilizou-se $\mathcal{U}^* \sim \sqrt{RaPr}$ na figura (a), mas os valores obtidos numericamente nas figuras (b) e (c).	118
5.21	Taxa de dissipação da energia cinética ajustada em função da macroescala de velocidade via MMQ. Para a reta em vermelho, $\mathcal{R}^2 = 0,996$. Para a reta em azul, em que forçou-se o coeficiente que multiplica a potência de \mathcal{U}^* a ser igual à unidade, $\mathcal{R}^2 = 0,991$	120

5.22	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 4 \times 10^4$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	124
5.23	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 2$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	125
5.24	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 1$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	126
5.25	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 2$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	127
5.26	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 1$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	128
5.27	Autoespectros de U^* , W^* e Θ'^* , e coespectro de W^* e Θ'^* , típicos em escoamento com $Ra = 1 \times 10^6$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).	129
5.28	Projeções bidimensionais das trajetórias percorridas em um espaço de fase pelas variáveis avaliadas em $(x^*, z^*) = (1/2, \Gamma/2)$ para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.	131
5.29	Comportamento típico do coeficiente de correlação de Pearson entre as séries temporais de Θ'^* avaliado no centro do escoamento e na posição $(x^*, z^*) = (\Gamma/2 + \Delta x^*, 1/2)$ para diferentes números de Rayleigh. As linhas contínuas (tracejadas) referem-se à configuração $m = 1$ ($m = 2$).	132
5.30	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 4 \times 10^4$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.	134
5.31	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 8 \times 10^4$, $m = 1$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.	135
5.32	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 8 \times 10^4$, $m = 2$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.	136

5.33	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 2 \times 10^5$, $m = 1$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$	137
5.34	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 2 \times 10^5$, $m = 2$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$	138
5.35	Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 1 \times 10^6$, $N_z = 125$ e $\Delta t = 1,5625 \times 10^{-6}$	139
5.36	Projeção no plano BC das trajetórias descritas em um espaço de fase pelas equações de Lorenz em regime estacionário para diferentes números de Rayleigh. As coordenadas dos atratores (em azul para $r = 5$, e em vermelho para $r = 22$) são dadas pelas equações (3.58)–(3.60).	141
5.37	Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) previstos pelas equações de Lorenz para $r = 22$ ($Ra \approx 1,45 \times 10^4$).	141
5.38	Projeções bidimensionais das trajetórias descritas em um espaço de fase pelas equações de Lorenz em regime caótico para diferentes números de Rayleigh. As coordenadas dos focos dos atratores (em azul para $r = 50$, e em vermelho para $r = 500$) são dadas pelas equações (3.58)–(3.60).	142
6.1	Campos de temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$ (acima) e do escalar passivo $Q^* - Q_0^*$ com $Le = 0,1$ (abaixo) determinados via DNS para $Ra = 10^6$	146
6.2	Campos de temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$ (acima) e do escalar passivo $Q^* - Q_0^*$ com $Le = 10,0$ (abaixo) determinados via DNS para $Ra = 10^6$	147
6.3	Média dos coeficientes de correlação entre as séries temporais (obtidas via DNS) de Θ^* e Q^* na seção $z^* = 1/2$ para diferentes números de Lewis e Rayleigh.	149
6.4	Coeficiente de correlação entre os escalares em função do número de Péclet da diferença entre os mesmos, definido em (6.1).	150
6.5	Coeficiente de correlação entre as séries temporais dos escalares ao longo da seção $z^* = 1/2$ para $Ra = 4 \times 10^4$ e $Ra = 1 \times 10^6$, respectivamente, e $Le = 0,1$	150
6.6	Valores médios em x^* na seção $z^* = 1/2$ das difusividades turbulentas de calor K_θ (em vermelho) e do escalar passivo K_q (em azul), calculadas com base nos gradientes locais dos escalares, em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh.	152
6.7	Razão entre fluxos turbulentos dos escalares (médios em x^* e em t^*) em função do coeficiente de correlação calculado via DNS para diferentes números de Lewis e Rayleigh.	153
6.8	Razões entre números de Nusselt, fluxos moleculares, advectivos e turbulentos médios em x^* (na seção $z^* = 1/2$) dos escalares (respectivamente) em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh.	154
6.9	Número de Nusselt do escalar passivo em função do número de Rayleigh para diferentes números de Lewis.	155
6.10	Função de coerência $\gamma_{\theta q}^2(n)$ (em roxo) e coeficiente de correlação espectral $\Upsilon_{\theta q}^2(n)$ (em verde) entre os escalares para $Ra = 10^6$ e diferentes números de Lewis. As retas verticais em preto, vermelho e azul indicam respectivamente τ_u^{*-1} , τ_θ^{*-1} e τ_q^{*-1}	157

6.11	Espaço de fase obtidos com as séries temporais dos escalares avaliados no centro do escoamento para $Ra = 10^6$ e Le variável (reta 1 : 1 em cinza).	158
6.12	Função de autocorrelação do escalar passivo $\varrho_{qq}(\Delta x^*)$ em função de Le para diferentes números de Rayleigh.	160
6.13	Correlação entre escalares prevista pelas equações de Lorenz e valores obtidos via DNS em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh, separadamente para as duas configurações possíveis do escoamento.	162
6.14	Razão entre fluxos turbulentos dos escalares em função do coeficiente de correlação conforme previsto pelas equações de Lorenz, e comparação com valores obtidos via DNS, para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.	163
6.15	Razão entre fluxos turbulentos dos escalares em função de Le conforme previsto pelas equações de Lorenz, e comparação com valores obtidos via DNS, para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.	164

Lista de siglas

CLA	Camada-Limite Atmosférica
DFT	<i>Discrete Fourier Transform</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DST	<i>Discrete Sine Transform</i>
EDO	Equação Diferencial Ordinária
FFT	<i>Fast Fourier Transform</i>
GL	Teoria de Grossmann e Lohse (2000)
HPA	Hidrocarboneto Policíclico Aromático
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
MMQ	Método dos Mínimos Quadrados
PAN	<i>Peroxyacetyl Nitrate</i>
RBC	<i>Rayleigh-Bénard Convection</i>
RK4	<i>Runge-Kutta Fourth-Order</i>
TKE	<i>Turbulence Kinetic Energy</i>

Lista de símbolos

Os principais símbolos e notações utilizados ao longo do texto estão listados a seguir. O leitor deve se atentar ao fato de que, às vezes, o mesmo símbolo foi utilizado para representar diferentes quantidades, o que ocorreu devido ao grande número de variáveis tratadas no presente trabalho. Nestes casos, espera-se que o contexto torne claro o significado da notação utilizada.

Notações

Se F é uma variável qualquer, as seguintes notações foram utilizadas:

F_0	Valor de F em $z = 0$.
F_r	Valor de F no estado de referência.
F'	Flutuação de Boussinesq de F , tal que $F = F_r + F'$, conforme equação (3.16).
$\langle F \rangle$	Média probabilística da variável aleatória F .
f	Flutuação turbulenta de F , tal que $F = \langle F \rangle + f$, conforme equação (3.65). Contudo, com o intuito de simplificar a notação, apenas no capítulo 4, letras minúsculas foram utilizadas para denotar flutuações de Boussinesq adimensionais, em outras partes do texto denotadas como F'^* . Algumas letras minúsculas, tais como a e b , também não representam flutuações turbulentas. Letras minúsculas que de fato representam flutuações turbulentas foram indicadas nesta lista ao lado do símbolo maiúsculo correspondente.
F^*	Forma adimensional de F .
F^\star	Conjugado complexo de F .
\hat{F}	Transformada de Fourier de F , dada por (3.89).
\tilde{F}	Estimativa intermediária de F em RK4. Também é usado para denotar os valores reescalados dos elementos de uma matriz. Ver equação (4.24).
F_∞	Valor de F em um estado estacionário.
F_c	Valor crítico de F .
$F_{i,k}^n$	F avaliada em $x^* = ih$, $z^* = kh$, $t^* = n\Delta t$.

Vetores e tensores de ordem 2

De forma geral, foi utilizado um sistema de coordenadas cartesianas no presente estudo. Assim, a i -ésima componente de um vetor \mathbf{v} é v_i , enquanto a i, j -ésima componente de um tensor de segunda ordem \mathbf{T} é T_{ij} .

D_A	Matriz diagonal cujos elementos são os autovalores de A .
\mathbf{g}, g_i	Aceleração da gravidade, cuja i -ésima componente em coordenadas cartesianas é $g_i = -g\delta_{i3}$.
I_n	Matriz identidade de ordem n .
\mathbf{j}, j_i	Vetor fluxo específico de massa de soluto, dado pela lei de Fick (3.14).
$\hat{\mathbf{n}}, \hat{n}_i$	Vetor unitário normal à superfície \mathcal{S} (ver figura 3.1).
\mathbf{q}, q_i	Vetor fluxo específico de calor por condução, dado pela lei de Fourier (3.11).
$\mathbf{S}, S_{ij}, \mathbf{s}, s_{ij}$	Tensor taxa de deformação, definido pela equação (3.6). Não confundir com os elementos s_{jk} da matriz DST S_{m-1} , dados por (4.22).
\mathbf{T}, T_{ij}	Tensor de tensões. Não confundir com a matriz tridiagonal de ordem n , T_n , ou sua versão cíclica, $T_n^{(P)}$.
$\mathbf{U}, U_i, \mathbf{u}, u_i$	Velocidade do escoamento (U, V, W) e flutuações turbulentas (u, v, w). Em aplicações do teorema do transporte de Reynolds (como em (3.1)), entretanto, dV é um elemento de volume em \mathcal{C} . Na seção 4.3.3, V_A é a matriz contendo os autovetores de A .
\mathbf{x}, x_i	Posição (x, y, z). Na seção 4.3.3, X e Y são matrizes quaisquer.
δ, δ_{ij}	Delta de Kronecker.
$\boldsymbol{\tau}, \tau_{ij}$	Parte do tensor de tensões que deve-se à ocorrência de movimento no meio contínuo (equação 3.5).
$\boldsymbol{\Omega}, \Omega_i, \boldsymbol{\omega}, \omega_i$	Vetor vorticidade.

Parâmetros adimensionais

Co	Número de Courant, definido em (4.29).
Fo	Número de Fourier, definido em (4.31).
Le	Número de Lewis, dado pela equação (3.33).
Nu_θ, Nu_q	Números de Nusselt para os fluxos de calor (equação (3.36)) e do escalar passivo, respectivamente.
Pe_θ, Pe_q	Números de Péclet da temperatura e do escalar passivo, dados pela equação (3.38).
$Pe_{\Delta\theta q}$	Número de Péclet da diferença entre os escalares, dado pela equação (6.1).
Pr	Número de Prandtl, dado pela equação (3.29).
Ra	Número de Rayleigh, dado pela equação (3.30).
Re, Re_T , Re_η	Números de Reynolds baseados nas macroescalas (equação (3.34)), na microescala de Taylor, e nas microescalas de Kolmogorov (equação (3.79)), respectivamente.
Sc	Número de Schmidt, dado pela equação (3.37).

Alfabeto romano

$A, B, C, D,$ E	Coeficientes das séries de Fourier de Ψ^* (3.51), Θ'^* (3.52) e Q'^* (3.52) que constituem as variáveis dependentes das equações de Lorenz. Em aplicações do teorema do transporte de Reynolds (como em (3.1)), entretanto, dA é um elemento de área em \mathcal{S} . A letra A também é utilizada na seção 3.1.5 para denotar um soluto, e A e B também representam matrizes genéricas na seção 4.3.3.
a	Número de onda horizontal reescalado (igual a $3k$), parâmetro das equações de Lorenz.
B_n	Coeficiente de Fourier usado na análise de estabilidade linear (equação (3.46)).
b	Função de a dada por (3.61).
$\text{Co}_{\theta q}$	Coespectro de θ e q , definido na equação (3.91).
c_p	Calor específico a pressão constante.
c_i	Constante real.
f	Função real genérica. Não confundir com os elementos f_{jk} da matriz DFT F_n , dados por (4.21).
f	Termo forçante, dado por (3.57), a ser adicionado na equação da temperatura para adequá-la às equações de Lorenz.
$G_{\theta q}$	Espectro cruzado unilateral entre θ e q , definido na equação (3.90).
g	Módulo da aceleração da gravidade. Não confundir com os elementos g_{jk} da matriz G , dada por (4.23).
H	Distância entre as placas no problema de Rayleigh-Bénard. Ver figura 1.1.
h	Espessura da malha utilizada na solução numérica.
i	Unidade imaginária, $i^2 = -1$.
i, j, k, m, n	Números inteiros utilizados como índices de somatórios. k também é utilizado como número de onda horizontal da série trigonométrica (3.50).
K_m, K_θ, K_q	Difusividades turbulentas de quantidade de movimento, calor e do escalar passivo, respectivamente. Denotadas com uma barra quando calculadas a partir do gradiente médio vertical (ver equação (6.2)).
L	Comprimento horizontal adotado para o domínio do problema de Rayleigh-Bénard.
L_t	Duração (adimensional) da simulação computacional.
N_x, N_z, N_t	Número de pontos de grade da simulação numérica nas direções x e z , e número de passos de tempo a serem resolvidos, respectivamente. O número total de pontos de grade às vezes é indicado simplesmente por N .
P, p	Pressão termodinâmica.
Q, q	Concentração mássica de soluto.
$\text{Qu}_{\theta q}$	Espectro de quadratura de θ e q , definido na equação (3.91).
$R_{\theta q}$	Função de covariância entre θ e q , definida na equação (3.88).
r	Número de Rayleigh normalizado pelo seu valor crítico Ra_c , dado pela equação (3.48).

$S_{\theta q}$	Espectro cruzado bilateral entre θ e q , definido na equação (3.89).
\tilde{s}	Elemento de um espaço amostral \mathbb{S} .
t	Tempo.
\tilde{u}	Microescala de velocidade.

Caracteres especiais

$\mathcal{A}_{m,n}$	Parte real de $\mathcal{C}_{m,n}$.
$\mathcal{B}_{m,n}$	Parte imaginária de $\mathcal{C}_{m,n}$.
$\mathcal{C}_{m,n}$	m, n -ésimo coeficiente complexo da série de Fourier (3.49).
\mathcal{C}	Região do espaço ocupada por um corpo material em um meio fluido (figura 3.1).
\mathbb{D}	Domínio qualquer pertencente ao \mathbb{R}^3 .
\mathcal{D}	Maior difusividade molecular adimensional, definida em (4.32).
\mathcal{H}	Entalpia específica.
\mathcal{L}	Macroescala de comprimento.
m	Número de pares de células convectivas ao longo de Γ .
n	Frequência cíclica.
\mathcal{P}	Produção de TKE por gradiente.
\mathcal{R}	Coeficiente de correlação de Pearson.
\mathbb{R}	Conjunto dos números reais.
\mathbb{S}	Espaço amostral.
\mathcal{S}	Superfície de um corpo material (figura 3.1).
\mathcal{T}	Macroescala de tempo.
\mathcal{T}	Duração de uma série temporal a partir da qual calcula-se o espectro via (3.95).
\mathcal{U}	Energia interna específica.
\mathcal{U}	Macroescala de velocidade.
\mathcal{V}	Volume específico φ^{-1} .
\mathbb{Z}	Conjunto dos números inteiros.

Letras gregas

α	Difusividade térmica (molecular).
β	Coeficiente de expansão térmica, definido na equação (3.13).
Γ	Razão de aspecto L/H adotada para o domínio do problema de Rayleigh-Bénard.
$\gamma_{\theta q}^2$	Função de coerência de θ e q , definida na equação (3.93).
Δt	Passo de tempo utilizado no método numérico.
$\Delta x, \Delta z$	Espessura da malha utilizada no método numérico, igual a h .

$\Delta\Theta$	Diferença de temperatura entre as placas no problema de Rayleigh-Bénard. Ver figura 1.1.
ΔQ	Diferença de concentração de soluto entre as placas no problema de Rayleigh-Bénard.
ϵ_M	Taxa de dissipação da energia cinética associada ao escoamento médio. Ver equação (3.71).
ε	Taxa de dissipação da TKE. Ver equação (3.71).
$\eta_u, \eta_\theta, \eta_q$	Microescalas de comprimento da velocidade, da temperatura e do escalar passivo.
η_B, η_C	Microescalas de comprimento Batchelor e Obukhov-Corrsin, dadas pelas equações (3.85) e (3.87), respectivamente.
Θ, θ	Temperatura termodinâmica.
κ	Difusividade molecular do soluto.
Λ	Coefficiente de viscosidade dinâmica (equação (3.7)).
λ	Distância entre centros de ascensão nas células observadas por Bénard (1900) (figura 2.1).
λ_{max}	Maiores comprimentos de onda observados em RBC.
λ_i^A	i -ésimo autovalor da matriz A .
λ_T	Microescala de Taylor.
μ	Coefficiente de viscosidade dinâmica (equação (3.7)).
ν	Viscosidade cinemática μ/ϱ .
Ξ, ξ	Variável auxiliar para o cálculo da taxa de dissipação da energia cinética. Ver equação (5.10).
\wp, ρ	Densidade. A rigor, \wp não é uma letra grega, mas sim o P de Weierstrass. Neste texto, entretanto, \wp tem o papel de ρ maiúsculo para evitar confusão com a pressão.
\wp_A	Concentração volumétrica do soluto A .
$\tilde{\rho}$	Ordem das variações de densidade.
ϱ	Correlação entre duas quantidades. Também utilizado para denotar a auto-correlação em função de uma separação Δx^* na direção horizontal.
σ	Parâmetro de estabilidade linear do problema de Rayleigh-Bénard (equação (3.46)).
τ_u	Microescala de tempo. Entretanto, na equação (3.88), τ é uma separação no tempo.
$\Upsilon_{\theta q}^2$	Coefficiente de correlação espectral entre θ e q , definido na equação (3.94).
χ_θ, χ_q	Número de vezes que a malha numérica é mais espessa que as microescalas de temperatura e do escalar passivo, respectivamente. Ver equação (4.33).
Ψ, ψ	Função corrente, definida na equação (3.39).
Ω, ω	Módulo da vorticidade. Sua flutuação turbulenta ω não deve ser confundida com w , flutuação de W .

Capítulo 1

Introdução

1.1 O transporte de escalares em escoamentos naturais

Diversos escalares estão presentes em escoamentos naturais. Na atmosfera, a dispersão de gases poluentes e material particulado, em geral fortemente influenciada por fluxos de calor e quantidade de movimento, é de grande interesse devido ao seu possível impacto sobre a saúde ambiental. Além disso, uma estimativa acurada da taxa de evapotranspiração em uma plantação é essencial para a sua irrigação adequada. Parâmetros de qualidade da água tais como a demanda bioquímica de oxigênio, o oxigênio dissolvido, a temperatura, e a concentração de nutrientes são escalares que devem ser monitorados, por exemplo, em reservatórios destinados ao abastecimento público e em rios que recebem efluentes industriais. Uma equação para a salinidade deve ser incluída em modelos de dispersão aplicados a estuários e oceanos, pois trata-se de um escalar ativo capaz de alterar significativamente a hidrodinâmica destes escoamentos.

Esses escalares são transportados através de diferentes mecanismos físicos: enquanto a advecção é o transporte pelo movimento médio do meio fluido, a difusão é a resposta molecular à presença de gradientes locais (Bird et al., 2002, p. 514). Além disso, há algumas razões práticas que motivam a definição adicional de um transporte turbulento, associado ao desvio das variáveis em relação ao valor médio e às não-linearidades dos fenômenos de transporte.

De forma geral, escoamentos naturais são turbulentos, o que faz com que possuam uma ampla faixa de escalas temporais e espaciais. Muito embora existam instrumentos de medição hidrometeorológicos desenvolvidos com o objetivo específico de medir alguma variável pontualmente em alta frequência, em uma tentativa de melhor representar todas as escalas temporais envolvidas, tais equipamentos apresentam custo elevado, não estão disponíveis para algumas variáveis, ou ainda, em alguns casos, alteram o escoamento de forma a reduzir a acurácia da medição, como ocorre com medidores de pressão, por exemplo. Os sensores usualmente utilizados para monitoramento ambiental realizam médias no espaço e no tempo, sendo incapazes de representar fenômenos associados a pequenas escalas.

Além disso, as não-linearidades das equações da Mecânica dos Fluidos fazem com que escoamentos turbulentos sejam extremamente sensíveis a perturbações, apresentando comportamento caótico (Mottet e Campbell, 2013). Uma consequência prática é a impossibilidade de se prever o tempo numericamente a longo prazo devido ao erro de truncamento em computadores e à ausência de informações precisas sobre as condições iniciais e de contorno. A caoticidade da turbulência motiva uma abordagem estatística em que escoamentos são tratados como variáveis aleatórias, cujos valores médios deseja-se obter.

Médias probabilísticas podem ser relacionadas com médias espaciais e temporais (e, portanto, com medições de sensores “lentos”) através do teorema ergódico (Bendat e Piersol, 2010,

p. 142). Ademais, a solução numérica das equações para o escoamento médio possui custo computacional bastante inferior ao custo de uma simulação numérica direta (DNS, do inglês *direct numerical simulation*) das equações de conservação pois, conforme discutido na seção 1.3, esta última exige elevadas resoluções espacial e temporal para fornecer resultados acurados.

A abordagem estatística leva ao surgimento do conceito de fluxos turbulentos. Sua desvantagem deve-se ao fato de que, sozinhos, os princípios de conservação da Mecânica dos Fluidos não são capazes de fornecer uma equação para tais fluxos sem introduzir novas variáveis, desconhecidas. As equações para o escoamento médio são apresentadas na seção 3.5.1.

1.2 Convecção de Rayleigh-Bénard

A convecção livre consiste em uma classe de escoamentos de considerável interesse para o estudo do transporte turbulento de escalares, pois ocorrem com frequência na natureza. Correntes de convecção se desenvolvem quando um fluido é aquecido pela base, o que produz um gradiente de densidade com sentido oposto à aceleração da gravidade. Assim, uma porção de fluido aquecida é mais leve que sua vizinhança e tende a ascender, tendo sua posição original preenchida por fluido mais frio e mais denso proveniente de níveis superiores.

Como exemplos nos contextos geofísico e astrofísico, pode-se citar as correntes de convecção no manto terrestre, que causam movimentação das placas tectônicas, e a liberação de calor pelas reações de fusão nuclear no interior do Sol, que é responsável pelo desenvolvimento de um escoamento do mesmo tipo. Além disso, estudos têm associado variações nos campos magnéticos do Sol e da Terra a correntes de convecção (Shishkina et al., 2010; Hepworth, 2014). A compreensão de escoamentos convectivos também possui diversas aplicações tecnológicas (Ahlers et al., 2009; Chillà e Schumacher, 2012).

Na atmosfera, gradientes de temperatura produzem movimentos de massas de ar em diversas escalas espaciais (Saltzman, 1962), influenciando brisas locais, a formação de nuvens (Danforth, 2001), a circulação global, e outros fenômenos. De especial interesse é a camada-limite atmosférica (CLA), definida como a porção inferior da troposfera diretamente impactada pelos fluxos de quantidade de movimento, calor sensível, vapor d'água e gases poluentes que ocorrem na superfície terrestre (Stull, 1988, p. 2; Dias, 2013). Em dias ensolarados sobre os continentes, o aquecimento da superfície pela radiação solar pode causar uma situação de instabilidade térmica, forçando um escoamento convectivo na CLA; surgem térmicas de ar quente ascendentes, assim como correntes de ar frio descendentes. Estas estruturas convectivas de grande escala são acompanhadas por vórtices turbulentos menores, promovendo a homogeneização das propriedades do escoamento.

Os escoamentos convectivos que ocorrem na natureza variam em suas geometrias e propriedades; consequentemente, apresentam níveis de complexidade distintos. Talvez o escoamento mais simples causado por empuxo seja aquele conhecido como convecção de Rayleigh-Bénard (RBC, do inglês *Rayleigh-Bénard convection*), nosso objeto de estudo. A geometria do problema varia na literatura: alguns estudos adotam um domínio tridimensional ou até mesmo cilíndrico, por exemplo. O presente estudo adota uma geometria bidimensional, ilustrada na figura 1.1, em que um fluido contido entre duas placas planas paralelas, infinitas na direção horizontal x e espaçadas de uma distância H na direção vertical z , é aquecido pela base. As placas são mantidas a uma diferença de temperatura $\Delta\Theta$, sendo Θ_0 a temperatura da placa inferior.

Dada a importância do transporte de escalares em inúmeros escoamentos naturais, este estudo adicionou um escalar passivo em RBC, diferentemente da maior parte da literatura sobre o tema. Tal escalar passivo pode ser interpretado como algum parâmetro de qualidade da água em um reservatório ou em um rio, ou ainda como a concentração de um gás poluente na atmosfera.

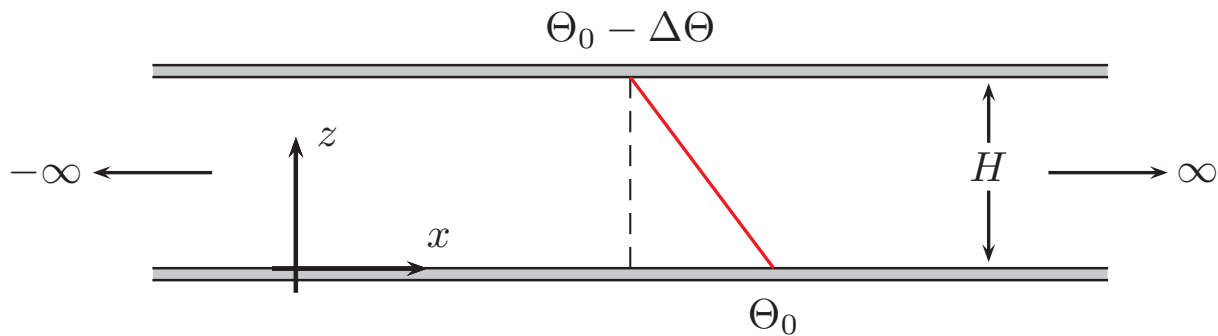


Figura 1.1: Representação esquemática do domínio do problema de Rayleigh-Bénard, em que duas placas infinitas na direção x e afastadas de uma distância H na direção vertical z são mantidas a uma diferença de temperatura $\Delta\Theta$, sendo Θ_0 a temperatura da placa inferior. A reta em vermelho representa o perfil linear de temperatura na situação estática.

Na natureza, existem outros escalares ativos além da temperatura produzindo escoamentos similares à convecção. Exemplos disso são o empuxo causado pela concentração de vapor d'água no ar acima de um lago, e a circulação termohalina nos oceanos, afetada simultaneamente pela temperatura e pela salinidade. [Yang et al. \(2018\)](#) analisaram o efeito de dois escalares ativos sobre RBC, o que não é o foco do presente estudo.

Os fluxos turbulentos são a principal forma de transporte de quantidade de movimento, calor, vapor d'água e poluentes na direção vertical na CLA ([Stull, 1988](#), p. 5); espera-se que os mesmos possuam um papel importante em RBC. Dentre as várias maneiras de simular fluxos turbulentos numericamente, este estudo optou pelo uso de DNS, que discutimos em seguida.

1.3 Por que DNS?

Com a exceção de alguns casos mais simples, as equações diferenciais que descrevem escoamentos de fluidos não possuem soluções analíticas, especialmente no caso de escoamentos turbulentos. Isto deve-se principalmente ao fato destas equações serem não-lineares, mas também por serem acopladas, de segunda ordem e, de forma geral, envolverem funções das três coordenadas espaciais e do tempo ([Pritchard, 2011](#), p. 208). Felizmente, o desenvolvimento de computadores cada vez mais eficientes possibilita a solução destas equações através de métodos numéricos.

Há diversas formas de simular escoamentos turbulentos numericamente. Existem modelos que estimam estatísticas do escoamento (tais como médias, covariâncias, etc.), dentre os quais cita-se os modelos $k-\varepsilon$ (possivelmente associados a outros modelos de fechamento, tais como o modelo de retorno à isotropia para os termos envolvendo flutuações de pressão, por exemplo) e os métodos que buscam estimar as funções densidade de probabilidade das variáveis do escoamento ([Pope, 2000](#), p. 336). Modelos para o escoamento médio podem se tornar especializados para aplicações particulares, destinando-se à obtenção de resultados rápidos, pois possuem custo computacional relativamente baixo. Pode-se aplicar, por exemplo, um modelo que supõe a existência de uma difusividade turbulenta para se obter uma estimativa inicial dos impactos causados pelo derramamento de uma substância tóxica em um rio, a fim de se determinar as medidas de controle e mitigação a serem tomadas imediatamente após o acidente.

Por outro lado, existem métodos que simulam realizações individuais de escoamentos turbulentos, produzindo resultados semelhantes a medições experimentais de laboratório ou campo. Este é o caso da simulação de grandes vórtices (LES, do inglês *large eddy simulation*) e DNS.

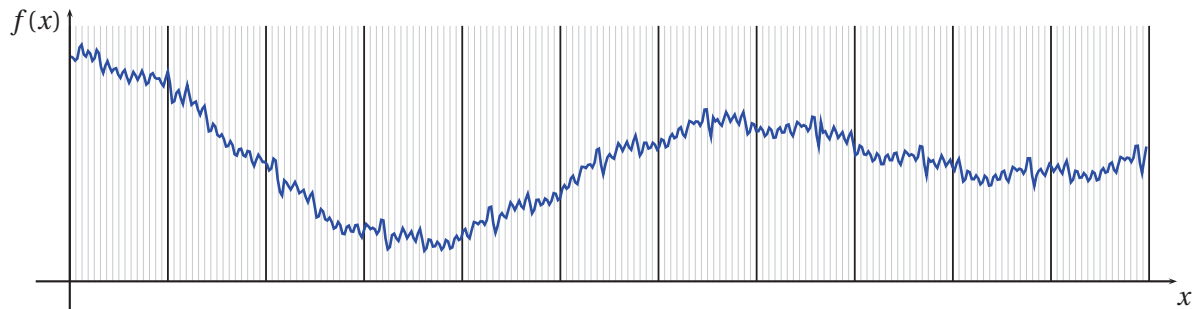


Figura 1.2: Função arbitrária (em azul) ilustrando fenômeno unidimensional. A malha utilizada em DNS (em cinza), capaz de resolver todos os fenômenos, possui espessura bastante inferior àquela da malha de LES (em preto), que por sua vez resolve apenas os fenômenos de maior escala, exigindo parametrização dos fenômenos de escala inferior à espessura da grade.

Em LES, aplica-se um filtro às equações de conservação e resolve-se diretamente apenas as maiores escalas do escoamento. Os fenômenos de escala inferior à largura do filtro, por sua vez, são parametrizados. Simulações deste tipo são úteis especialmente quando o objetivo do estudo é analisar as escalas energéticas do escoamento em questão, o que é comum, dado que tais escalas são as principais responsáveis pelo transporte de propriedades. A parametrização dos fenômenos de menor escala deve dissipar a energia transferida a esta escala (Davidson, 2004, p. 427).

Em DNS, as equações de conservação da Mecânica dos Fluidos são resolvidas diretamente com o auxílio de algum método numérico. Entretanto, um esquema numérico só é capaz de representar fenômenos que ocorrem em escalas espaciais superiores à espessura da grade utilizada. Logo, para que o resultado de DNS seja acurado, todas as escalas da turbulência, das macroescalas às microescalas, devem ser resolvidas pela malha numérica. Assim, conforme ilustrado na figura 1.2, enquanto, em LES, fenômenos de escala inferior à malha numérica são parametrizados, em DNS deve-se garantir, através do uso de uma malha suficientemente fina, que fenômenos deste tipo não existam.

Dentre os diferentes métodos de simulação de escoamentos turbulentos, DNSs são capazes de gerar resultados com o maior nível de descrição, a partir dos quais é possível, por exemplo, a extração de quaisquer estatísticas e a visualização de estruturas turbulentas, tais como estruturas coerentes, camadas-limite, etc.. Além disso, por produzirem resultados extremamente acurados, DNSs são às vezes chamados de “experimentos numéricos” (Davidson, 2004, p. 423). Isto deve-se ao fato de que, em DNS, os efeitos das pequenas escalas sobre as maiores não são parametrizados como em LES; tampouco são parametrizados os fluxos turbulentos, como é feito por modelos que resolvem o escoamento médio. Além de frequentemente resultarem em uma perda significativa de acurácia, tais parametrizações em geral não são universais, isto é, valem apenas para determinados escoamentos. Por outro lado, DNS pode ser utilizado para a simulação de escoamentos com diferentes propriedades, geometrias, e condições iniciais e de contorno (Pope, 2000, p. 338). Neste estudo, arbitrou-se realizar DNS devido à sua acurácia e ao seu nível de descrição, o que possibilita a obtenção de resultados associados a todas as escalas do escoamento (inclusive a “medição” direta de fluxos turbulentos) sem que seja necessário supor a validade de algum modelo de turbulência: com exceção dos erros numéricos, os resultados obtidos são exatamente aqueles preditos pelas equações de conservação da Mecânica dos Fluidos.

O grande problema associado a DNS é o custo computacional resultante da necessidade

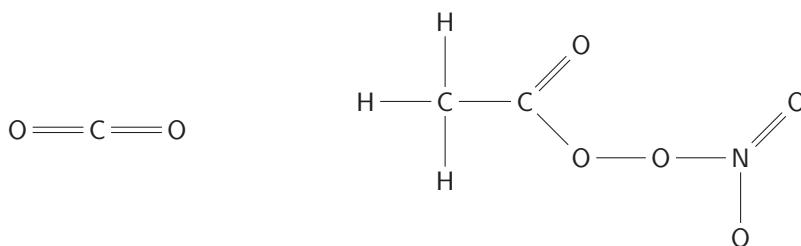


Figura 1.3: Estruturas das moléculas de dióxido de carbono (à esquerda) e de nitrato de peroxi-acetila (à direita).

de se representar todas as escalas do escoamento. A representação das grandes escalas, que contêm a maior parte da energia cinética do escoamento, exige que o domínio numérico seja suficientemente grande. No outro extremo, para a representação das menores escalas, em que ocorre a dissipação viscosa da energia cinética em energia interna, é necessário que a espessura da grade numérica possua a ordem de grandeza da microescala de Kolmogorov. O resultado é uma grade numérica formada por um número enorme de pontos que, conforme demonstrado matematicamente na seção 3.6.1, aumenta exponencialmente com um aumento do número de Reynolds do escoamento. Na prática, isto limita a aplicação de DNS a escoamentos moderadamente turbulentos. Na realidade, pode-se mostrar que a maior parte do custo computacional de simulações diretas que utilizam métodos espectrais está associada à resolução desta escala dissipativa (Pope, 2000, p. 349; Davidson, 2004, p. 428), o que explica a grande vantagem da parametrização da mesma em LES.

Entretanto, diante das limitações computacionais, DNS pode ser visto como uma ferramenta de pesquisa cuja finalidade é elucidar a física dos escoamentos, e não como um método de resolver problemas de engenharia com finalidade prática (Moin e Mahesh, 1998). Além disso, o custo computacional de se simular diretamente RBC é parcialmente reduzido pelo fato de que este é um problema bidimensional.

1.4 Justificativa e objetivos

A modelagem acurada do transporte turbulento de diferentes escalares é fundamental para diversas aplicações em Hidrologia, Saneamento, Micrometeorologia, Mecânica dos Fluidos Geofísicos, etc. Como exemplo, considere a CLA sobre o continente na ausência de fenômenos de mesoescala ou de escala sinótica. Nesta situação, é possível em teoria identificar o topo da CLA como uma camada em que a temperatura potencial diminui com um aumento da altura. Nesta camada, movimentos verticais são inibidos devido à forte estabilidade térmica do meio, de forma que poluentes emitidos na superfície tendem a permanecer contidos na CLA. Em situações de intensa poluição atmosférica, tais como um episódio de *smog* fotoquímico, diversos gases poluentes distintos estão presentes em concentrações significativas, tais como o ozônio, óxidos de nitrogênio e diferentes compostos orgânicos voláteis (Baird e Cann, 2012, p. 76).

Enquanto a dependência dos fluxos difusivos em relação ao escalar transportado é bem conhecida, sendo descrita através das equações constitutivas associadas à definição de difusividades moleculares, não é clara a dependência dos fluxos turbulentos em relação ao escalar transportado. A figura 1.3 ilustra duas moléculas tipicamente presentes em situações de intensa poluição atmosférica: o dióxido de carbono e o nitrato de peroxiacetila (PAN, do inglês *peroxyacetyl nitrate*), sendo este último um poluente secundário formado durante episódios de *smog* fotoquímico. Suas estruturas moleculares distintas produzem moléculas com diferentes

propriedades, dentre elas o peso molecular e o diâmetro de colisão. A interação entre tais moléculas e o ar atmosférico, descrita por exemplo através do potencial de Lennard-Jones, também é afetada por suas estruturas. Segundo a teoria de Chapman–Enskog, todos estes fatores alteram suas difusividades moleculares (Cussler, 2009, p. 119). Contudo, não se sabe ao certo o quanto a estrutura molecular de um gás é capaz de afetar seu transporte turbulento. De maneira similar, a equação de Stokes–Einstein indica que a difusividade molecular de um soluto em um meio líquido depende do raio das partículas de soluto e da viscosidade do fluido; a dependência entre tais quantidades e o transporte turbulento do soluto, entretanto, é desconhecida.

Na realidade, a questão estende-se para outros escalares além de substâncias químicas. Dias (2013) afirma que é comum na literatura de turbulência atmosférica a hipótese de que todos os escalares se comportam como a temperatura, cujas flutuações são mais facilmente medidas do que as flutuações de concentração de diversos gases, por exemplo. Além disso, o método da razão de Bowen para estimar a evapotranspiração supõe que as difusividades turbulentas, ou ainda, as funções de similaridade (segundo a teoria de Monin-Obukhov), da temperatura e da umidade são iguais, o que é questionado por Verma et al. (1978) e Brutsaert (1982, p. 67).

Portanto, o objetivo do presente estudo é utilizar o problema de Rayleigh–Bénard para investigar se existe uma dependência entre os fluxos turbulentos de escalares e as características moleculares dos mesmos. De maneira mais ampla, deseja-se verificar a hipótese de similaridade entre escalares (no caso, a temperatura e um soluto passivo) de diferentes difusividades moleculares. A compreensão desta questão é fundamental para que sejam desenvolvidos modelos com finalidades práticas de Engenharia acurados, tais como modelos de dispersão ambiental, usados como ferramenta de previsão para subsidiar o licenciamento ambiental de atividades potencialmente poluidoras. Em geral, tais modelos resolvem equações para o escoamento médio envolvendo fluxos turbulentos, para os quais não há uma equação universal. Por isso, este estudo utiliza DNS como uma ferramenta de pesquisa para que os fluxos turbulentos possam ser “medidos” diretamente, o que pode contribuir para o desenvolvimento de modelos aplicados mais acurados.

Este texto está organizado da seguinte maneira: o capítulo 2 descreve brevemente a literatura sobre DNS, RBC, e similaridade entre escalares, desde os trabalhos pioneiros sobre os temas até o estado da arte. Em seguida, o capítulo 3 revisa as equações de conservação da Mecânica dos Fluidos, e obtém a formulação vorticidade–função corrente, adimensional, e com a aproximação de Boussinesq, a qual é resolvida numericamente com condições iniciais e de contorno adequadas através dos métodos descritos no capítulo 4. Ademais, a seção 3.4 deduz as equações de Lorenz, as quais consistem em uma descrição simplificada de RBC e cuja solução numérica é facilmente obtida, razão pela qual também foram utilizadas para avaliar a similaridade entre escalares. Na seção 3.5, as equações para o escoamento médio são obtidas e os fluxos turbulentos são definidos matematicamente. Uma estimativa da ordem de grandeza das menores escalas da turbulência que devem ser resolvidas em DNS é feita na seção 3.6. Os resultados sobre a dinâmica do escoamento e sobre a similaridade entre os escalares são apresentados separadamente nos capítulos 5 e 6, respectivamente. Finalmente, o capítulo 7 traz algumas considerações finais e recomendações para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

2.1 Simulações numéricas diretas

2.1.1 Histórico

Orszag e Patterson Jr. (1972) foram pioneiros ao realizar um DNS de turbulência isotrópica, homogênea, e tridimensional, ainda que de baixa resolução, utilizando métodos espectrais. Suas simulações foram feitas com um número de Reynolds baseado na microescala de Taylor igual a 35 (de acordo com Davidson (2004, p. 424), na literatura de DNS, tornou-se convencional usar o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor ao invés do número de Reynolds baseado nas macroescalas, dado que tais simulações costumam possuir maior interesse em escalas intermediárias ou pequenas). O próximo grande passo foi dado por Rogallo (1981), que adicionou um cisalhamento médio ao escoamento anterior. O algoritmo resultante formou a base para os códigos DNS de turbulência homogênea desenvolvidos posteriormente.

Os recursos computacionais da época não permitiam a realização de DNS de escoamentos próximos de paredes, pois a presença de camadas-limite nestas regiões exige o uso de uma malha numérica fina (Moin e Mahesh, 1998). Assim, apenas escoamentos com superfícies livres de cisalhamento podiam ser simulados diretamente. Escoamentos próximo de paredes eram simulados utilizando LES; contudo, era necessário o emprego de modelos ad hoc. O primeiro DNS de escoamento em um canal plano foi realizado por Kim et al. (1987). Posteriormente, um trabalho bastante reconhecido foi o DNS de uma camada-limite turbulenta sobre uma placa plana realizado por Spalart (1988), que atingiu um valor máximo do número de Reynolds baseado na espessura de quantidade de movimento igual a 1410. DNS de escoamentos compressíveis começaram a ser realizados principalmente a partir dos anos 1990, sendo Sarkar et al. (1991) um exemplo.

Embora a complexidade dos escoamentos simulados diretamente tenha aumentado consideravelmente ao longo dos anos, ainda hoje, DNS é limitado pela eficiência computacional disponível para escoamentos com números de Reynolds moderados (Davidson et al., 2011, p. 420). Uma das simulações diretas mais conhecidas na literatura, aquela de um escoamento em canal realizada por Moser et al. (1999), atinge um valor máximo do número de Reynolds baseado nas macroescalas igual a 590. Lee e Moser (2015) realizaram um DNS do mesmo escoamento até um número de Reynolds aproximadamente igual a 5200, o que mostra que o desenvolvimento da tecnologia da computação tem possibilitado o aumento (ainda que lento) do número de Reynolds dos escoamentos simulados diretamente. Outro exemplo disso é a compilação, feita por Schlatter e Örlü (2010), de resultados referentes a camadas-limite sobre uma placa plana obtidos a partir de DNS, expandindo os dados inicialmente obtidos por Spalart (1988) para números

de Reynolds até aproximadamente 4300. Outras simulações diretas recentes incluem o DNS de um escoamento em um tubo realizado por [Wu e Moin \(2008\)](#) para um valor máximo do número de Reynolds baseado no diâmetro da tubulação igual a 44000.

2.1.2 Aplicações

A maior parte dos problemas de engenharia que envolvem escoamentos apresenta números de Reynolds elevados, fazendo com que o custo computacional de DNS impossibilite sua adoção como um método prático de solução de problemas, já que tanto a memória requerida quanto o tempo de processamento são demasiadamente elevados. Felizmente, a realização de simulações diretas cada vez mais complexas tem se tornado possível graças ao aumento exponencial da velocidade dos computadores nas últimas décadas ([Pope, 2000](#), p. 340). Métodos de programação paralela também têm contribuído para o aumento da popularidade de experimentos numéricos. Ainda assim, o número de Reynolds dos escoamentos simulados diretamente dobra a cada década, o que é uma taxa relativamente lenta ([Davidson, 2004](#), p. 425).

Muito embora os domínios dos escoamentos simulados diretamente possam ser complexos, eles devem ser pequenos, sendo impossível simular diretamente escoamentos atmosféricos (mesmo fenômenos micrometeorológicos), ou ainda escoamentos em estuários, rios e oceanos. Possivelmente, a humanidade nunca será capaz de simular diretamente toda a atmosfera terrestre ([Lesieur, 2008](#), p. 420). Além disso, a limitação de DNS a baixos números de Reynolds possui a desvantagem adicional de impedir o surgimento de alguns resultados clássicos, tais como a faixa inercial (que depende da separação das escalas de produção e dissipação de energia) ou ainda a lei log para o perfil de velocidades próximo a paredes. Tais resultados são típicos de escoamentos com número de Reynolds elevado, e sua ausência pode dificultar a interpretação dos resultados em DNS ([Moin e Mahesh, 1998](#)).

Portanto, simulações com finalidade prática devem utilizar LES, ou então resolver as equações para o escoamento médio associadas a algum modelo de fechamento. Para evitar que tais modelos reduzam a acurácia dos resultados, os mesmos podem ser desenvolvidos com o auxílio de DNS e experimentos. De fato, DNS surgiu com o objetivo original de verificar a validade de modelos de fechamento ([Davidson et al., 2011](#), p. 361). Simulações diretas são capazes de fornecer as estatísticas necessárias para a calibração de modelos de fechamento, mas não estão limitadas a isto: com DNS, é possível realizar qualquer tipo de estudo fundamental em turbulência para dar origem a resultados teóricos, como, por exemplo, relações de escala. Na realidade, a grande vantagem de DNS é a possibilidade de se obter qualquer quantidade desejada sobre o escoamento, pois toda a sua história está disponível em todos os pontos do domínio ([Spalart, 1988](#)).

Apesar de suas limitações, DNS apresenta diversas vantagens sobre experimentos. Em campo ou em laboratório, não há como controlar as condições inicial e de contorno completamente devido à presença de perturbações aleatórias impostas pelo ambiente. Além disso, a rigor, a simples presença de um equipamento de medição altera o escoamento em algum grau. Tais problemas não existem em DNS, que ainda possibilita a obtenção de quantidades dificilmente obtidas experimentalmente, tais como medições próximo a superfícies, flutuações de pressão (como realizado por [Spalart \(1988\)](#)), estatísticas lagrangianas (como realizado por [Yeung e Pope \(1989\)](#)) e a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência. Em geral, esta última não pode ser diretamente medida em experimentos de campo, sendo portanto estimada através das equações de Kolmogorov para a faixa inercial do espectro, da função estrutura e da ogiva, cada estimativa possuindo um erro associado ([Freire et al., 2018](#)).

Outra limitação de experimentos deve-se ao fato de que não existem métodos de medição

em alta frequência de escalares com difusividades moleculares muito diferentes entre si, objeto de estudo do presente trabalho. Por exemplo, embora a concentração de alguns gases (tais como o monóxido de carbono, o ozônio, e óxidos de nitrogênio) possa ser medida a alta frequência com analisadores automáticos, existem substâncias, tais como hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs), cujas concentrações devem ser medidas com borbulhadores, resultando em médias de oito horas.

DNS também pode ser usado para a simulação de escoamentos idealizados, que não podem facilmente ser reproduzidos em laboratório, mas trazem entendimento da física da turbulência (Moin e Mahesh, 1998). Este é claramente o caso de RBC com a geometria ilustrada na figura 1.1, bidimensional e infinita na direção horizontal. Além disso, em DNS, as propriedades do escoamento são arbitrárias (Ahlers et al., 2009). No presente estudo, tais propriedades são controladas através de parâmetros adimensionais.

Finalmente, destaca-se que, em experimentos, deve-se aceitar a validade da hipótese ergódica para calcular valores esperados como médias temporais, enquanto em DNS também é possível simular o mesmo escoamento diversas vezes aplicando-se perturbações aleatórias para calcular médias amostrais, bastante próximas dos valores esperados para amostras suficientemente grandes. Dadas as vantagens e limitações de experimentos e simulações diretas, conclui-se que ambos se complementam e devem ser usados em conjunto para melhor compreensão de escoamentos turbulentos.

2.1.3 Métodos numéricos

Dado que a definição de DNS é simplesmente a resolução numérica direta das equações de conservação, diferentes métodos numéricos podem ser utilizados para este fim. Desde o trabalho de Orszag e Patterson Jr. (1972), métodos pseudo-espectrais são bastante utilizados em DNS até os dias atuais. Nestes métodos, as variáveis do escoamento são expandidas em séries de Fourier (razão pela qual tais métodos envolvem a aplicação de condições de contorno periódicas), e as menores escalas resolvidas são determinadas por um número de onda máximo. Métodos pseudo-espectrais diferem dos métodos puramente espectrais por resolverem os termos não-lineares das equações de Navier-Stokes no domínio do espaço-tempo (Pope, 2000, p. 345).

Embora bastante acurados, resultados obtidos com métodos espectrais possuem um erro associado ao *aliasing* que deve ser removido ou controlado. Embora tal erro não seja um problema exclusivo destes métodos, neste caso, o mesmo deve-se à representação das variáveis do escoamento através de um número finito de frequências. Operações não-lineares geram frequências adicionais, cuja energia é adicionada aos modos representados. Este erro, se não removido, faz com que métodos espectrais sejam particularmente suscetíveis a problemas de instabilidade numérica, e também pode causar um decaimento excessivo da turbulência.

Neste trabalho, arbitrou-se utilizar o método de diferenças finitas, que em particular apresenta a vantagem de que as ferramentas de programação paralela podem ser aplicadas a algoritmos que utilizam este método com relativa facilidade, diferentemente do que ocorre com métodos espectrais. Além disso, em implementações computacionais, o número de operações cresce linearmente com o número N de pontos da malha no método de diferenças finitas, ao invés de aumentar segundo $N \log N$ como ocorre em métodos espectrais, uma diferença que se torna especialmente importante em problemas com várias dimensões e domínios muito grandes.

Moin e Mahesh (1998) perceberam que o uso de diferenças finitas em DNS tem se tornado cada vez mais comum recentemente. Por exemplo, Wu e Moin (2008) utilizam um método de diferenças finitas de segunda ordem para simular diretamente o escoamento no interior de um tubo. As fontes de dados sobre camadas-limite mais recentes utilizadas por Schlatter e

Örlü (2010) incluem simulações diretas realizadas com diferenças finitas. Aproximações de ordem superior permitem um ligeiro aumento na espessura da malha numérica, razão pela qual o presente estudo utilizou aproximações de quarta ordem, assim como Liu et al. (2003).

Quanto ao método de discretização das derivadas temporais, em geral utiliza-se esquemas explícitos (tais como o método de Runge-Kutta de terceira ou quarta ordem) ou semi-implícitos em DNS. Estes últimos avaliam os termos viscosos implicitamente (utilizando, por exemplo, o método de Crank-Nicolson) e os termos convectivos explicitamente (Moin e Mahesh, 1998). Métodos implícitos são atraentes devido à sua elevada estabilidade linear, que permite o uso de passos de tempo largos. Entretanto, em DNS é necessário que fenômenos de alta frequência sejam representados. Choi e Moin (1994) mostraram que, para escoamento em canal, mesmo usando um esquema completamente implícito, a necessidade de resolver as pequenas escalas demanda que o passo de tempo utilizado seja consideravelmente inferior à microescala de Kolmogorov para que flutuações turbulentas se mantenham, de forma que o esquema implícito não apresentou grandes vantagens (em termos de eficiência computacional) sobre o esquema explícito.

2.2 Convecção de Rayleigh-Bénard

2.2.1 Primeiros estudos

O primeiro pesquisador a estudar experimentalmente o escoamento em um tanque aquecido pela base foi Bénard (1900). Bénard utilizou líquidos pouco voláteis para evitar a variação da espessura da camada de fluido, pois sua superfície superior foi mantida livre para permitir a visualização do escoamento. Observou-se que o escoamento atingia um estado permanente quando fluidos consideravelmente viscosos e uma taxa de aquecimento relativamente baixa eram utilizados. Formaram-se estruturas hexagonais atualmente conhecidas como “células de Bénard”, ilustradas juntamente com a nomenclatura utilizada por Bénard na figura 2.1.

Os métodos de observação utilizados foram descritos em Bénard (1901). Para visualizar as características gerais do escoamento, foram introduzidas partículas sólidas de diferentes densidades a serem transportadas passivamente. Medições precisas foram realizadas com o auxílio de diferentes métodos ópticos.

Atualmente, sabe-se que o escoamento observado por Bénard não foi induzido por efeitos de empuxo, como ocorre com o que é conhecido como Convecção de Rayleigh-Bénard. Na realidade, Pearson (1958) mostrou que o aquecimento de camadas de fluido finas como aquelas utilizadas por Bénard faz com que surjam forças associadas à tensão superficial, que por sua vez são responsáveis pela produção e manutenção de um escoamento.

Para provar que efeitos de tensão superficial produziram o escoamento visualizado por Bénard, Pearson realizou uma análise de estabilidade análoga àquela feita previamente por Rayleigh (1916). Pearson obteve um critério que prevê corretamente a ocorrência de escoamento mesmo em condições que o critério de Rayleigh, referente à instabilidade decorrente de variações de densidade, não permite a formação de correntes de convecção. Embora o objetivo original de Rayleigh fosse explicar analiticamente os resultados obtidos por Bénard, seu critério de estabilidade é adequado para o problema atualmente conhecido como RBC, e é obtido na seção 3.3.2 do presente texto.

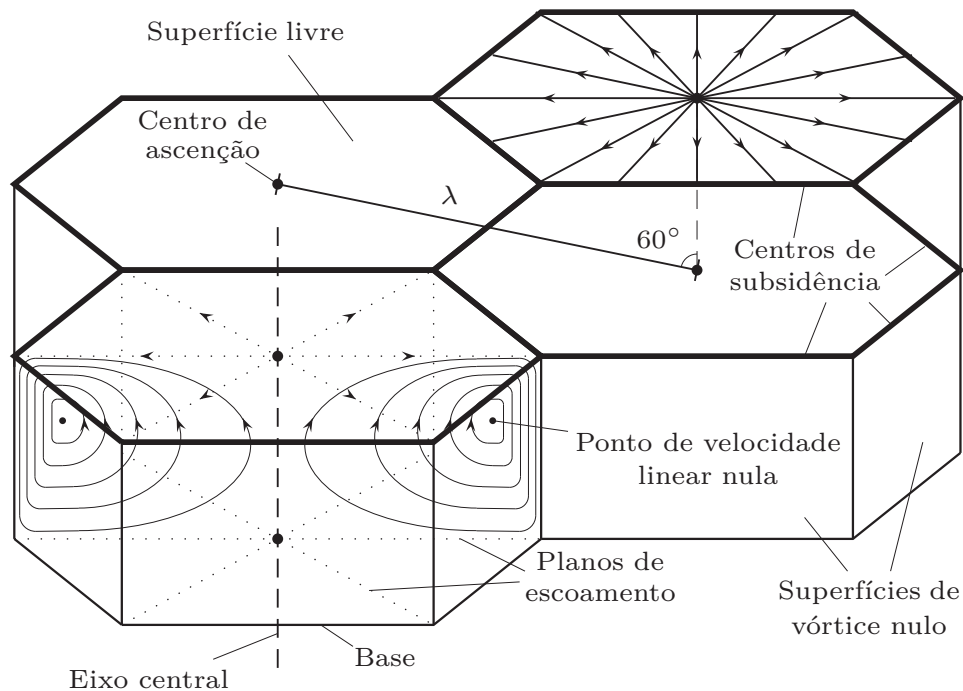


Figura 2.1: Representação esquemática das estruturas observadas por [Bénard \(1900\)](#) e traduções da nomenclatura originalmente utilizada pelo autor.

2.2.2 Relação com as equações de Lorenz

Com o objetivo de elucidar os processos não-lineares que ocorrem na atmosfera, [Saltzman \(1962\)](#) expandiu as variáveis que descrevem RBC em séries de Fourier. Diferentemente do que havia sido previamente realizado por outros autores, Saltzman estendeu o método para problemas não-permanentes, permitindo que os coeficientes de tais séries dependessem do tempo. Como exemplo do método, o autor resolveu numericamente um sistema truncado contendo apenas sete coeficientes. Suas soluções revelaram, sob determinadas condições, a existência de um regime estacionário, em conformidade com os resultados de [Bénard \(1900\)](#) e [Rayleigh \(1916\)](#). Entretanto, [Saltzman \(1962\)](#) alertou que o número de coeficientes que devem ser mantidos aumenta conforme deseja-se simular escoamentos em que a turbulência é mais intensa.

Motivado pelo problema de se prever o tempo a longo prazo, [Lorenz \(1963\)](#) estudou as soluções de um sistema de três equações não-lineares obtidas a partir da metodologia proposta por Saltzman. Ao verificar que tais as soluções eram extremamente sensíveis às condições iniciais, alteradas completamente na presença dos menores erros numéricos, Lorenz deu origem à Teoria do Caos ([Mottet e Campbell, 2013](#)). A representação destas soluções em um espaço de fase revela a existência de atratores caóticos de dimensão fractal ao redor dos pontos correspondentes às soluções estacionárias. As soluções não-periódicas das equações de Lorenz podem ser consideradas correspondentes a escoamentos turbulentos por serem imprevisíveis devido à sua natureza não-linear. Neste sentido, o presente estudo utiliza (além de DNS) o sistema de Lorenz para estimar os fluxos de calor e do escalar passivo em RBC.

Diversos autores utilizaram as equações de Lorenz para estudar escoamentos convectivos. [Danforth \(2001\)](#) mediu a temperatura da água escoando no interior de um termosifão (tubulação circular aquecida pela base), e obteve resultados com o mesmo comportamento qualitativo das soluções das equações de Lorenz. [Liu et al. \(2003\)](#) utilizaram as equações de Lorenz para verificar a acurácia do método numérico por eles desenvolvido, muito semelhante àquele adotado

pelo presente estudo. Um sistema de equações muito semelhante às equações de Lorenz foi obtido por [Araujo et al. \(2005\)](#) a partir de um balanço de forças e energia aplicado a uma porção de fluido em RBC. Finalmente, [Chen e Price \(2006\)](#) mostraram que, devido ao truncamento das séries de Fourier, as equações de Lorenz permitem a existência de apenas duas soluções permanentes diferindo no sentido do escoamento, enquanto RBC possui infinitas soluções permanentes diferindo na posição horizontal das estruturas convectivas. Os autores foram capazes de recuperar este comportamento adicionando dois coeficientes ao sistema original de Lorenz.

2.2.3 Desenvolvimentos recentes

Atualmente, a pesquisa sobre RBC une experimentos, simulações numéricas e uma abordagem teórica em uma tentativa de melhor compreender os fenômenos que ocorrem neste escoamento. Destaca-se que grande parte da literatura usa uma geometria diferente daquela ilustrada na figura 1.1, adotando paredes laterais adiabáticas e placas superior e inferior fixas, em que a velocidade se anula ([Ahlers et al., 2009](#)). Estas condições são mais facilmente obtidas experimentalmente do que a geometria e as condições de contorno com tensão cisalhante nula sobre as placas utilizadas neste estudo. Tais condições foram adotadas neste trabalho por serem aquelas necessárias para obtenção das equações de Lorenz.

Recentemente, muito esforço foi feito para explicar como os números de Nusselt e de Reynolds, medidas adimensionais do fluxo vertical de calor entre as placas e da intensidade da turbulência, respectivamente, se relacionam com os números de Rayleigh e de Prandtl, resultando na teoria de [Grossmann e Lohse \(2000\)](#), estendida para a presença de um segundo escalar ativo por [Yang et al. \(2018\)](#) (neste texto, os parâmetros adimensionais são definidos matematicamente na seção 3.2.3). Muito interesse tem sido destinado às camadas-limite cinemáticas, formadas sobre placas fixas e responsáveis pela dissipação da energia da circulação de larga escala, e às camadas-limite térmicas, das quais se destacam plumas que contribuem para o fluxo de calor vertical e para a manutenção do escoamento ([Ahlers et al., 2009](#)).

Ademais, discute-se a possibilidade de haver uma outra relação de escala em RBC, além daquelas obtidas por [Kolmogorov \(1941\)](#) para a faixa inercial em turbulência isotrópica, conhecida como Bolgiano–Obukhov *scaling*. Esta relação é obtida através de uma análise dimensional semelhante àquela utilizada para deduzir a teoria de Kolmogorov, adicionando o produto entre o coeficiente de expansão térmica do fluido e a aceleração da gravidade como parâmetro relevante ([Lohse e Xia, 2010](#)). Entretanto, nem medições experimentais, nem simulações numéricas, demonstraram definitivamente a existência desta relação, o que possivelmente deve-se a diversos motivos. Primeiramente, RBC consiste em um escoamento não-homogêneo, anisotrópico e intermitente. Além disso, muitas medições experimentais são realizadas pontualmente, e séries temporais são convertidas em séries espaciais através da hipótese da turbulência congelada de Taylor, a qual não é válida em RBC, em que a velocidade média é menor ou comparável em magnitude às flutuações de velocidade. Além disso, talvez seja impossível obter a separação entre escalas necessária para visualizar esta relação pois, conforme [Lohse e Xia \(2010\)](#) discutem usando a ideia da cascata de energia, a análise dimensional necessária para obtê-la está (do ponto de vista físico) fundamentalmente incorreta.

[Lohse e Xia \(2010\)](#) destacam que há poucos experimentos em RBC envolvendo escalares passivos, sendo [Gluckman et al. \(1993\)](#) e [Zhou e Xia \(2008\)](#) exemplos de estudos que adicionaram um corante em RBC. Por outro lado, simulações numéricas deste tipo são mais comuns na literatura. [Celani et al. \(2002\)](#), por exemplo, simularam numericamente RBC bidimensional com a presença de um escalar passivo, e mostraram que as funções de estrutura de ordem par de ambos os escalares apresentam as mesmas relações de escala com a distância. Além disso,

Tabela 2.1: Valores máximos do número de Rayleigh atingidos em DNS de RBC (Ahlers et al., 2009).

Autores	Ra	Método numérico
Balachandar et al. (1989)	$6,5 \times 10^6$	Espectral
DeLuca et al. (1990)	$1,6 \times 10^8$	Espectral (2D)
Kerr (1996)	$2,0 \times 10^7$	Espectral
Benzi et al. (1998)	$3,5 \times 10^7$	Lattice Boltzmann
Verzicco e Camussi (1999)	$2,0 \times 10^7$	Diferenças finitas
Amati et al. (2005)	$2,0 \times 10^{14}$	Diferenças finitas
Stringano e Verzicco (2006)	$2,0 \times 10^{11}$	Diferenças finitas

sabe-se que, para ambos os escalares, os expoentes destas relações tendem a valores constantes conforme aumenta-se a ordem da função de estrutura, um fenômeno conhecido como saturação.

Em resumo, existem inúmeros aspectos de RBC sendo estudados. Além daqueles previamente mencionados neste texto, Ahlers et al. (2009) também discutem a análise dos efeitos da violação das condições necessárias para a validade da aproximação de Boussinesq, a investigação sobre a possível existência de um regime assintótico para número de Rayleigh elevado, e ainda a verificação de que a circulação de grande escala (também chamada de “vento turbulento”) é uma simples evolução das células convectivas existentes em escoamentos com baixo número de Rayleigh ou envolve fenômenos físicos adicionais. Ahlers et al. (2009) indicam que estudos subsequentes devem incluir efeitos de rotação, a presença de bolhas ou partículas em suspensão, e fluidos sofrendo mudanças de fase em RBC.

A tabela 2.1 lista alguns dos trabalhos citados por Ahlers et al. (2009) que realizaram DNS de RBC, e apresenta o maior número de Rayleigh simulado e o método numérico utilizado em cada caso. Destaca-se que tais simulações também diferem quanto a outros parâmetros (tais como o número de Prandtl, a geometria e o tamanho do domínio, e as condições de contorno), os quais também afetam seus custos computacionais. Além disso, a resolução espacial utilizada por Amati et al. (2005) foi considerada insuficiente.

2.3 Similaridade entre escalares

Há várias maneiras de se quantificar quão similar é o comportamento de duas quantidades escalares. As medidas mais comumente encontradas na literatura são a razão entre as suas difusividades turbulentas (definidas na equação (3.69)), o coeficiente de correlação de Pearson, a função de coerência (definida na equação (3.93)) e o coeficiente de correlação espectral (definido na equação (3.94)). Todas essas quantidades são unitárias no caso de similaridade perfeita, e são apresentadas para os escalares em RBC no capítulo 6. Outras medidas que podem servir ao mesmo propósito, mas não são utilizadas no presente estudo, são a eficiência de transferência relativa (Cancelli et al., 2012), as funções de similaridade de Monin-Obukhov (Dias e Brutsaert, 1996), e medidas baseadas em análise de quadrantes (Li e Bou-Zeid, 2011).

Além de difusividades moleculares distintas, foco do presente estudo, existem diversos fatores que são potenciais fontes de dissimilaridade entre quantidades escalares. Um exemplo são as diferenças entre as suas condições de contorno, em especial quando a superfície possui sua própria dinâmica interna (Hill, 1989), ou os gradientes médios dos escalares possuem sinais opostos. Além disso, também atribui-se a dissimilaridade entre escalares a efeitos de advecção local, ao fato de um escalar poder ser ativo e o outro passivo, e à não-estacionariedade do escoamento (Cancelli et al., 2012). Reações químicas também podem alterar a difusividade

turbulenta de substâncias na atmosfera [Brost et al. \(1988\)](#).

A fim de estudar analiticamente a similaridade entre escalares na CLA estável, [Warhaft \(1976\)](#) escreveu equações para os fluxos turbulentos verticais de calor e umidade supondo estacionariedade e homogeneidade horizontal. Desprezando diversos termos, obteve, para cada escalar, uma equação de balanço entre os termos de produção pelo gradiente médio, de empuxo, e de pressão, para o qual usou modelos de fechamento relativamente simples para encontrar expressões analíticas para a razão entre as difusividades turbulentas dos escalares.

Os resultados sugeriram que tais difusividades podem ser muito diferentes entre si, especialmente nos casos em que um dos escalares é passivo (mas não ambos, caso em que suas difusividades turbulentas devem ser idênticas), ou quando seus gradientes médios possuem sinais opostos. Para o caso particular em que a umidade é um escalar passivo, o autor chegou a uma relação explícita entre a razão entre as difusividades e a correlação entre os escalares. Tal relação sugere que, quando a correlação entre os escalares é fraca, o que frequentemente ocorre na CLA, suas difusividades turbulentas podem ser significativamente diferentes, sendo a difusividade de calor menor que a difusividade de umidade em condições estáveis.

Contudo, [Verma et al. \(1978\)](#) verificaram o oposto de tal previsão teórica através de medições experimentais em uma região em que uma atmosfera com inversão de temperatura era causada pela advecção de ar quente sobre uma superfície fria. Tais autores obtiveram coeficientes de difusividade turbulenta de calor sensível e vapor d'água a partir de medições meteorológicas (de radiação líquida, temperatura e umidade) e no solo (com lisímetros e placas de fluxo de calor), e com o auxílio de uma equação de balanço de energia na superfície terrestre, concluindo que quase sempre o primeiro é maior que o segundo. Apesar disso, os resultados experimentais de [Verma et al. \(1978\)](#) concordam com a previsão de [Warhaft \(1976\)](#) no sentido de que os coeficientes de difusividade turbulenta serão bastante diferentes entre si quando os gradientes médios dos escalares apresentarem sinais opostos.

Capítulo 3

Formulação matemática

3.1 Princípios fundamentais

Primeiramente, deduzimos brevemente as equações de conservação da Mecânica dos Fluidos. Deduções mais detalhadas podem ser encontradas, por exemplo, em [Kundu et al. \(2016, cap. 4\)](#). São enfatizadas as hipóteses necessárias para se obter cada equação, e diferentes formas de enunciar cada princípio são apresentadas, cada uma delas podendo ser mais adequada para a realização de determinada análise.

3.1.1 Conservação da massa

Considera-se um corpo material \mathcal{C} delimitado pela superfície material \mathcal{S} em um escoamento (figura 3.1). Esse corpo é definido como uma porção de fluido de identidade imutável, ou seja, composta sempre pelas mesmas partículas de fluido. Assim, a velocidade de cada ponto pertencente a \mathcal{C} coincide com a velocidade $\mathbf{U} = (U, V, W) = (U_1, U_2, U_3)$ do escoamento. Consequentemente, sua posição varia com o tempo t e o corpo é deformável.

Postula-se a existência de uma função densidade $\wp(\mathbf{x}, t)$, sendo $\mathbf{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ o vetor posição, cuja integral de volume em $\mathcal{C}(t)$ resulta na massa deste corpo. O princípio da conservação da massa estabelece que tal massa não varia ao longo do tempo. Usando o teorema do transporte de Reynolds, tem-se que

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{C}(t)} \wp(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\mathcal{C}(t)} \frac{\partial \wp}{\partial t} dV + \oint_{\mathcal{S}(t)} \wp \hat{n}_i U_i dA = 0, \quad (3.1)$$

em que dV é um elemento de volume em \mathcal{C} , dA é um elemento de área em \mathcal{S} , e \hat{n}_i é a i -ésima componente do vetor unitário normal a \mathcal{S} em cada ponto desta superfície apontando para fora de \mathcal{C} . Neste texto, vale a notação de Einstein, segundo a qual há um somatório implícito nos índices que se repetem em um mesmo termo de uma equação. De forma geral, os índices variam de 1 a 3. A soma é impedida quando os índices são colocados entre parênteses. Em (3.1), D/Dt denota a derivada material.

Usando o teorema da divergência, pode-se reescrever a integral de superfície em (3.1) como uma integral de volume. Escrevendo a equação resultante como uma única integral de volume e aplicando-se o teorema da localização (segundo o qual o fato de uma integral ser nula quando calculada sobre qualquer subconjunto de um domínio \mathbb{D} implica na nulidade do integrando em todos os pontos de \mathbb{D}), tem-se a forma diferencial da equação da continuidade,

$$\frac{\partial \wp}{\partial t} + \frac{\partial(\wp U_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (3.2)$$

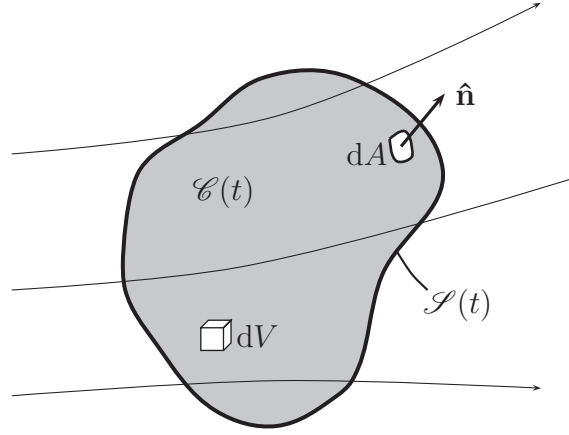


Figura 3.1: Corpo material $\mathcal{C}(t)$ delimitado pela superfície material $\mathcal{S}(t)$ em um escoamento. Um elemento de volume em \mathcal{C} é dV , enquanto um elemento de área em \mathcal{S} é dA . O vetor unitário normal a \mathcal{S} apontando para fora de \mathcal{C} é \hat{n} .

Esta equação pode ser reescrita alternativamente em termos do volume específico $\mathcal{V} = \wp^{-1}$:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{D\mathcal{V}}{Dt}. \quad (3.3)$$

3.1.2 Conservação da quantidade de movimento

Também postula-se a existência de um campo vetorial $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ (já utilizado anteriormente) tal que a quantidade de movimento de \mathcal{C} seja igual à integral de volume do produto $\wp \mathbf{U}$ em \mathcal{C} . Pelo princípio da conservação da quantidade de movimento, sabe-se que a taxa de variação da quantidade de movimento de \mathcal{C} é igual à soma das forças que agem sobre o corpo. Em um referencial inercial, estas são a força peso e as tensões agindo sobre $\mathcal{S}(t)$, de tal forma que

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{C}(t)} \wp U_i dV = \int_{\mathcal{C}(t)} \wp g_i dV + \oint_{\mathcal{S}(t)} \hat{n}_j T_{ij} dA,$$

em que g_i é a i -ésima componente do vetor aceleração da gravidade $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$, e T_{ij} é a i, j -ésima componente do tensor de tensões \mathbf{T} .

Expandindo a derivada material com o teorema do transporte de Reynolds, reescrevendo as integrais de superfície em termos de integrais de volume com o auxílio do teorema da divergência, e aplicando novamente o teorema da localização, tem-se

$$\frac{\partial(\wp U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\wp U_i U_j)}{\partial x_j} = \wp g_i + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}.$$

Esta equação pode ser simplificada expandindo-se as derivadas dos produtos do lado esquerdo e utilizando a equação da continuidade. Dividindo o resultado por \wp , e reconhecendo a derivada material de U_i do lado esquerdo, encontra-se a equação do movimento de Cauchy:

$$\wp \frac{DU_i}{Dt} = \wp g_i + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}. \quad (3.4)$$

O tensor de tensões pode ser decomposto em uma parte referente à pressão termodinâmica P , igual à tensão total em situações estáticas, e uma parte τ_{ij} presente apenas quando há movimento:

$$T_{ij} = -P\delta_{ij} + \tau_{ij}, \quad (3.5)$$

em que δ_{ij} é o delta de Kronecker. Em fluidos newtonianos, τ_{ij} se relaciona com o tensor taxa de deformação, cujo i,j -ésimo elemento é

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.6)$$

através da equação constitutiva

$$\tau_{ij} = \Lambda \delta_{ij} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} + 2\mu S_{ij}, \quad (3.7)$$

em que Λ e μ são coeficientes de viscosidade dinâmica (Kundu et al., 2016, p. 127). Portanto, o balanço de quantidade de movimento pode ser reescrito como

$$\rho \frac{DU_i}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho g_i + \Lambda \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) + 2\mu \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j}. \quad (3.8)$$

3.1.3 Energia cinética do escoamento

É possível obter uma equação para a energia cinética do escoamento a partir do princípio da conservação da quantidade de movimento. Embora não forneça um princípio físico independente deste último, essa equação permite uma compreensão física mais profunda sobre o escoamento. Multiplicando a equação de Cauchy (3.4) por U_i , obtém-se o teorema trabalho-energia cinética:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{U_i U_i}{2} \right) = \rho g_i U_i + U_i \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}.$$

O último termo contém apenas a fração do trabalho das tensões que acelera uma partícula de fluido, o que ocorre apenas quando há divergência do campo de tensões. Esse termo pode ser reescrito como

$$U_i \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial (U_i T_{ij})}{\partial x_j} - T_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j},$$

evidenciando que essa fração é igual ao trabalho total (que apenas redistribui a energia cinética no meio fluido) subtraída do trabalho de deformação, que retira energia cinética do escoamento e converte-a em energia interna.

Usando (3.5) para reescrever o trabalho de deformação, a equação para a energia cinética fica

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{U_i U_i}{2} \right) = \rho g_i U_i + \frac{\partial (U_i T_{ij})}{\partial x_j} + P \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \tau_{ij} S_{ij}. \quad (3.9)$$

O penúltimo termo em (3.9) é o trabalho realizado pelas forças associadas à pressão, reversível, pois a divergência da velocidade pode ser positiva ou negativa. Já o último termo refere-se à taxa de dissipação da energia cinética do escoamento, correspondente à sua conversão irreversível em energia interna. É possível provar que $\tau_{ij} S_{ij}$ é sempre positivo para fluidos newtonianos utilizando a hipótese de Stokes (embora a rigor isso não seja necessário), segundo a qual a pressão em um ponto é igual à media das tensões normais agindo sobre o mesmo, de tal forma que

$$P = -\frac{T_{ii}}{3} \quad \Rightarrow \quad \Lambda = -\frac{2}{3}\mu.$$

Usando este resultado em (3.7), após uma quantidade razoável de manipulações algébricas, mostra-se que

$$\tau_{ij} S_{ij} = 2\mu \left[S_{ij} S_{ij} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right)^2 \right] = 2\mu \left[S_{ij} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right]^2 \geq 0.$$

3.1.4 Conservação da energia

Postula-se a existência de uma função energia interna específica $\mathcal{U}(\mathbf{x}, t)$ tal que a integral de volume do produto $\wp \mathcal{U}$ em \mathcal{C} fornece a energia interna contida em \mathcal{C} . A energia total deste corpo é igual à soma de suas energias interna e cinética. De acordo com a primeira lei da termodinâmica, a taxa de variação desta energia total é igual à taxa de recebimento de calor menos a taxa de realização de trabalho por \mathcal{C} , o que inclui os trabalhos da força peso e das tensões agindo sobre \mathcal{S} . Considerando-se que não há fluxos de calor por radiação ou fontes internas de energia, tais como reações químicas, tem-se

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{C}(t)} \wp \left(\mathcal{U} + \frac{1}{2} U_i U_i \right) dV = \int_{\mathcal{C}(t)} \wp g_i U_i dV + \oint_{\mathcal{S}(t)} \hat{n}_j T_{ij} U_i dA - \oint_{\mathcal{S}(t)} \hat{n}_i q_i dA,$$

em que q_i é a i -ésima componente do vetor fluxo de calor por condução.

Expandindo a derivada material utilizando o teorema do transporte de Reynolds, reescrevendo as integrais de superfície como integrais de volume através do teorema da divergência, e aplicando o teorema da localização, encontra-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\wp \left(\mathcal{U} + \frac{1}{2} U_i U_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\wp U_j \left(\mathcal{U} + \frac{1}{2} U_i U_i \right) \right] = \wp g_i U_i + \frac{\partial (T_{ij} U_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}.$$

Esta equação pode ser grandemente simplificada expandindo as derivadas de produtos e identificando o surgimento das equações da continuidade (3.2) e de Cauchy (3.4). O resultado é

$$\wp \frac{D\mathcal{U}}{Dt} = T_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}.$$

Dado que o tensor de tensões é simétrico, a soma dos produtos de seus elementos com os elementos do tensor gradiente de velocidade é igual à soma dos produtos de seus elementos com os elementos da parte simétrica deste último, ou seja, o tensor taxa de deformação. Ainda, separando o tensor de tensões segundo (3.5), tem-se

$$\wp \frac{D\mathcal{U}}{Dt} = -P \frac{\partial U_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} S_{ij} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (3.10)$$

Os dois primeiros termos do lado direito de (3.10) aparecem com seus sinais trocados do lado direito da equação para a energia cinética (3.9), tornando evidente seu papel de conversão de energia cinética em energia interna. Escrevendo a divergência da velocidade em termos do volume específico através da equação da continuidade (3.3), e definindo a entalpia $\mathcal{H} \equiv \mathcal{U} + P\mathcal{V}$, encontra-se

$$\wp \frac{D\mathcal{H}}{Dt} - \frac{DP}{Dt} = \tau_{ij} S_{ij} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}.$$

O fluxo específico de calor por condução é dado pela equação constitutiva conhecida como lei de Fourier:

$$q_i = -\wp c_p \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial x_i}, \quad (3.11)$$

em que c_p é o calor específico a pressão constante, α é a difusividade térmica e Θ é a temperatura termodinâmica. Supondo que o produto $\wp c_p \alpha$ é uniforme no espaço, e escrevendo a entalpia em termos da temperatura através do calor específico a pressão constante, com o auxílio das relações de Maxwell (Batchelor, 2000, p. 25; Borgnakke e Sonntag, 2009, p. 570) tem-se

$$\wp c_p \frac{D\Theta}{Dt} - \beta \Theta \frac{DP}{Dt} = \tau_{ij} S_{ij} + \wp c_p \alpha \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x_i \partial x_i}, \quad (3.12)$$

em que β é o coeficiente de expansão térmica, definido como

$$\beta(\Theta) \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{d\mathcal{V}}{d\Theta}. \quad (3.13)$$

3.1.5 Conservação da massa de um soluto

Postula-se a existência de uma função concentração volumétrica do soluto A , \wp_A , tal que sua integral de volume em \mathcal{C} resulte na massa de soluto contida em \mathcal{C} . A taxa de variação desta massa é igual à integral de superfície do fluxo difusivo de A através de \mathcal{S} , o qual existe graças ao fato do soluto possuir uma velocidade relativa ao escoamento médio, fazendo com que o mesmo não se mova com a velocidade da superfície material (Bird et al., 2002, p. 515). Assim,

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{C}(t)} \wp_A dV = - \oint_{\mathcal{S}(t)} \hat{n}_i j_i dA,$$

em que j_i é a i -ésima componente do vetor fluxo específico de massa de soluto. Expandindo a derivada material usando o teorema do transporte de Reynolds, reescrevendo as integrais de superfície em termos de integrais de volume usando o teorema da divergência, e usando o teorema da localização, tem-se

$$\frac{\partial \wp_A}{\partial t} + \frac{\partial(\wp_A U_i)}{\partial x_i} = - \frac{\partial j_i}{\partial x_i}.$$

O fluxo difusivo de massa é descrito pela equação constitutiva conhecida como lei de Fick:

$$j_i = -\wp \kappa \frac{\partial Q}{\partial x_i}, \quad (3.14)$$

em que κ é a difusividade molecular do soluto e $Q = \wp_A/\wp$ é a concentração mássica de A . Reescrevendo $\wp_A = Q\wp$ na equação diferencial e expandindo as derivadas dos produtos, é possível simplificá-la usando a equação da continuidade (3.2). Escrevendo o fluxo difusivo dado pela lei de Fick, e supondo que o produto $\wp \kappa$ é uniforme no espaço, tem-se a equação de transporte de um escalar conservativo:

$$\frac{DQ}{Dt} = \kappa \frac{\partial^2 Q}{\partial x_i \partial x_i}. \quad (3.15)$$

3.2 Equações de Boussinesq

Nesta seção, são discutidas as simplificações adicionais das equações de conservação possíveis quando as mesmas são aplicadas a RBC. O resultado é o sistema de equações de Boussinesq. Tal procedimento também é realizado em Rodakoviski (2016) e em Danforth (2001).

3.2.1 O estado de referência

Cada uma das variáveis que descrevem o escoamento (considere, de forma geral, uma variável F) é escrita como a soma de seus valores em um estado de referência (denotado F_r) e uma flutuação (indicada por F'), referida como flutuação de Boussinesq:

$$F(\mathbf{x}, t) = F_r(z) + F'(\mathbf{x}, t). \quad (3.16)$$

Toma-se como estado de referência a situação estática. Assim, $\mathbf{U}_r = \mathbf{0}$, e a velocidade é sua própria flutuação. Como o estado de referência é permanente e só apresenta variações na direção vertical, a equação para a temperatura (3.12) torna-se

$$\frac{d^2 \Theta_r}{dz^2} = 0.$$

Considerando que há forçantes externas mantendo a temperatura da placa inferior constante e igual a Θ_0 , e a temperatura da placa superior também constante, mas igual a $\Theta_0 - \Delta\Theta$, obtém-se o perfil linear de referência:

$$\Theta_r = \Theta_0 - \Delta\Theta \frac{z}{H}. \quad (3.17)$$

Para o escalar passivo, analogamente,

$$Q_r = Q_0 - \Delta Q \frac{z}{H},$$

supondo que há um mecanismo externo ao sistema que mantém os valores de Q constantes nas placas, diferindo de ΔQ .

Visto que a temperatura é considerada o único escalar ativo do problema, é possível expandir a densidade em série de Taylor em torno de Θ_0 :

$$\wp(\Theta) = \wp(\Theta_0) + \left. \frac{d\wp}{d\Theta} \right|_{\Theta_0} (\Theta - \Theta_0) + \mathcal{O}(\Theta^2),$$

em que a notação $\mathcal{O}(\Theta^2)$ indica termos de ordem Θ^2 ou superior. Usando a definição do coeficiente de expansão térmica (3.13), e denotando $\wp(\Theta_0) = \wp_0$, $\beta(\Theta_0) = \beta_0$, pode-se aproximar

$$\wp(\Theta) \approx \wp_0 [1 - \beta_0 (\Theta - \Theta_0)].$$

Escrevendo $\Theta = \Theta_r + \Theta'$, e usando Θ_r dado por (3.17), encontra-se

$$\wp = \wp_0 \left[1 - \beta_0 \left(\Theta' - \Delta\Theta \frac{z}{H} \right) \right].$$

No estado de referência, $\Theta' = 0$, e a flutuação de densidade é

$$\wp' = -\wp_0 \beta_0 \Theta'. \quad (3.18)$$

Finalmente, o gradiente de pressão no estado de referência é obtido a partir da equação hidrostática com \wp_r ,

$$\frac{\partial P_r}{\partial x_i} = \wp_r g_i. \quad (3.19)$$

3.2.2 A aproximação de Boussinesq

A hipótese de que a densidade do escoamento varia muito pouco relativamente a \wp_0 faz com que as equações de conservação possam ser bastante simplificadas. Primeiramente, reescrevemos a equação da continuidade (3.2) como

$$\frac{D\wp}{Dt} + \wp \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.20)$$

e em seguida identificamos a ordem de magnitude de cada termo. Se a ordem das variações de densidade é $\tilde{\rho} \ll \wp_0$, a ordem de magnitude da velocidade e de suas variações é \mathcal{U} , os comprimentos são da ordem de H e a escala de tempo característica é H/\mathcal{U} , tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{D\wp}{Dt} &\sim \frac{\mathcal{U} \tilde{\rho}}{H}, \\ \wp \frac{\partial U_{(i)}}{\partial x_{(i)}} &\sim \frac{\mathcal{U} \wp_0}{H}, \end{aligned}$$

em que a notação \sim significa “possui a ordem de magnitude de”. Individualmente, cada membro que compõe o segundo termo de (3.20), que é uma soma, é muito maior que o primeiro termo. Assim, a sua soma é muito menor que cada um deles; eles se compensam. Portanto, sob a aproximação de Boussinesq, o campo de velocidades é solenoidal:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.21)$$

Supondo que a divergência do campo de velocidades multiplicada pelos coeficientes de viscosidade também é muito menor que os termos restantes da equação da conservação da quantidade de movimento (3.8), a mesma pode ser simplificada para dar origem às equações de Navier-Stokes:

$$\wp \frac{DU_i}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \wp g_i + \mu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j}.$$

Dividindo esta equação por \wp_0 , pode-se considerar que a razão \wp/\wp_0 é igual à unidade para todos os termos, exceto para aquele referente à força peso, pois considera-se que, em escoamentos convectivos, a gravidade é a aceleração mais importante à qual uma porção de fluido é submetida. Neste caso, o pequeno desvio de \wp/\wp_0 em relação à unidade não pode ser desprezado, já que o mesmo se torna importante quando multiplicado por g_i . O resultado é

$$\frac{DU_i}{Dt} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\wp}{\wp_0} g_i + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j},$$

em que $\nu = \mu/\wp$ é a viscosidade cinemática. Escrevendo P e \wp como seus valores no estado de referência somados a flutuações, e usando (3.18) e (3.19), encontra-se

$$\frac{DU_i}{Dt} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P'}{\partial x_i} - \beta_0 \Theta' g_i + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (3.22)$$

Quanto à equação da energia (3.12), considera-se que o trabalho de deformação $\tau_{ij} S_{ij}$, que remove energia cinética do escoamento e converte-a em energia interna, acarreta em uma variação de temperatura desprezível em um ponto em RBC quando comparada às variações decorrentes de outros mecanismos de transferência de calor no problema. Uma analogia pode ser feita à perda de carga em turbulações, situação em que o trabalho de deformação causa significativa redução na energia cinética do escoamento, devendo portanto ser levado em consideração no projeto de redes de distribuição de água, por exemplo. Contudo, a correspondente variação de temperatura do fluido é desprezível.

Além disso, variações de temperatura causadas por variações de pressão podem ser consideradas desprezíveis em RBC. Para provar este fato, considera-se que a ordem de magnitude do primeiro termo de (3.12) é

$$\wp c_p \frac{D\Theta}{Dt} \sim \frac{\wp_0 c_p \Delta \Theta \mathcal{U}}{H}.$$

Já a ordem de magnitude da derivada material da pressão é

$$\frac{DP}{Dt} \sim \mathcal{U} \frac{\partial P}{\partial x_i}.$$

Uma primeira estimativa com a equação hidrostática leva a

$$\frac{\partial P_r}{\partial x_i} \sim \wp_0 g.$$

Embora o estado dinâmico não seja hidrostático, supõe-se que as acelerações verticais não alteram o campo de pressão a ponto de tornar seus gradientes superiores àqueles do estado de referência. Logo, a ordem de magnitude do segundo termo é

$$\beta\Theta \frac{DP}{Dt} \sim \beta_0\Theta_0\mathcal{U}\varrho_0g.$$

Arbitrando valores típicos para a água e para o ar, $c_p \sim 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\beta_0 \sim 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, $\Delta\Theta \sim 10 \text{ K}$ (como usado por [Deardorff e Willis \(1985\)](#)), $\Theta_0 \sim 10^2 \text{ K}$ e $H \sim 10^{-1} \text{ m}$, verifica-se que o primeiro termo é da ordem de $10^5\varrho_0\mathcal{U}$, enquanto o termo referente à pressão é da ordem de $\varrho_0\mathcal{U}$, e portanto pode ser desprezado.

O último termo de (3.12), o termo difusivo, não pode ser desprezado, pois é uma fonte importante de diferença entre os escalares, objeto de estudo deste trabalho. Além disso, este termo se torna importante nas equações de segunda ordem, pois dá origem à taxa de dissipação da semi-variância do escalar. Assim, a equação para a temperatura sob a aproximação de Boussinesq é

$$\frac{D\Theta}{Dt} = \alpha \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x_i \partial x_i}. \quad (3.23)$$

Separando Θ em seu valor no estado de referência e flutuações, encontra-se

$$\frac{D\Theta'}{Dt} = W \frac{\Delta\Theta}{H} + \alpha \frac{\partial^2 \Theta'}{\partial x_i \partial x_i}. \quad (3.24)$$

Analogamente, para o escalar passivo,

$$\frac{DQ'}{Dt} = W \frac{\Delta Q}{H} + \kappa \frac{\partial^2 Q'}{\partial x_i \partial x_i}. \quad (3.25)$$

3.2.3 Adimensionalização das equações

Com o objetivo de resolver o problema independentemente de sua escala e reduzir o número de parâmetros arbitrários existentes, são definidas variáveis adimensionais dividindo as variáveis dimensionais por suas respectivas escalas características. Seguindo [Saltzman \(1962\)](#), adota-se a distância H entre as placas como escala de comprimento e, inspirando-se no fato de que a condução de calor é a principal forçante do escoamento, utiliza-se H^2/α como escala de tempo. Consequentemente, a escala de velocidade é α/H . É importante destacar que isto não significa que a velocidade é da ordem de magnitude de α/H ; esta é apenas uma escala característica, mas a velocidade adimensional não é forçada a ser de ordem unitária, como discutido posteriormente.

Denotando grandezas adimensionais com um asterisco, a equação da continuidade torna-se

$$\frac{\partial U_i^*}{\partial x_i^*} = 0. \quad (3.26)$$

Usando $\Delta\Theta$ como escala de temperatura e $\varrho_0\alpha^2/H^2$ como escala de pressão, as duas componentes da equação da conservação da quantidade de movimento (considerando que RBC ocorre no plano xz) ficam

$$\frac{DU^*}{Dt^*} = -\frac{\partial P'^*}{\partial x^*} + \text{Pr} \frac{\partial^2 U^*}{\partial x_j^* \partial x_j^*}, \quad (3.27)$$

$$\frac{DW^*}{Dt^*} = -\frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \text{Ra Pr} \Theta'^* + \text{Pr} \frac{\partial^2 W^*}{\partial x_j^* \partial x_j^*}, \quad (3.28)$$

em que

$$\text{Pr} \equiv \frac{\nu}{\alpha} \quad (3.29)$$

é o número de Prandtl, e

$$\text{Ra} \equiv \frac{\beta_0 g \Delta \Theta H^3}{\nu \alpha} \quad (3.30)$$

é o número de Rayleigh.

Finalmente, as equações adimensionais para os escalares são (usando ΔQ como escala de concentração)

$$\frac{D\Theta'^*}{Dt^*} = W^* + \frac{\partial^2 \Theta'^*}{\partial x_i^* \partial x_i^*}, \quad (3.31)$$

$$\frac{DQ'^*}{Dt^*} = W^* + \text{Le} \frac{\partial^2 Q'^*}{\partial x_i^* \partial x_i^*}, \quad (3.32)$$

em que

$$\text{Le} \equiv \frac{\kappa}{\alpha} \quad (3.33)$$

é o número de Lewis. As escalas características adotadas por diferentes autores nem sempre são as mesmas, o que conduz a equações adimensionais aparentemente diferentes, porém equivalentes (ver, por exemplo, [Saltzman \(1962\)](#) e [Liu et al. \(2003\)](#)).

Assim, obteve-se apenas três parâmetros adimensionais independentes governando o problema. O número de Prandtl, função do estado termodinâmico do escoamento e independente de outros parâmetros do mesmo (tais como a geometria), é uma medida da tendência que uma porção de fluido possui de transferir energia através de tensões cisalhantes relativamente à condução de calor, e pondera os termos viscosos nas equações (3.27) e (3.28).

O número de Rayleigh, por sua vez, sendo uma medida da razão entre a força de empuxo e as forças viscosas que agem sobre uma porção de fluido, e que ainda considera o efeito da condução de calor, depende do estado termodinâmico e de outros parâmetros do escoamento. Este número é uma medida da instabilidade térmica em RBC, e pondera as flutuações de temperatura em (3.28). Situações de estabilidade térmica possuem valores baixos de Ra, enquanto escoamentos intensamente turbulentos possuem valores elevados de Ra. Sendo assim, elevados valores de Ra correspondem a elevados valores do número de Reynolds, Re.

Uma maneira de se obter uma relação entre tais parâmetros adimensionais é partir da hipótese de que a aceleração mais importante em RBC é o empuxo. Assim, da componente vertical da equação (3.22),

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{U}^2}{H} &\sim \beta_0 \Delta \Theta g, \\ \mathcal{U} &\sim \sqrt{\beta_0 \Delta \Theta g H}, \end{aligned}$$

o que equivale a dizer que o número de Richardson possui ordem unitária em RBC, como ocorre em situações de convecção natural. Esta escala de velocidade é conhecida como velocidade de queda livre ([Stevens et al., 2010](#)). Logo, o número de Reynolds baseado nas macroescalas é

$$\text{Re} \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\nu} \sim \sqrt{\frac{\text{Ra}}{\text{Pr}}}. \quad (3.34)$$

Na realidade, a relação $\text{Re} = \text{Re}(\text{Ra}, \text{Pr})$ em RBC varia em função do regime de escoamento, pois a definição do número de Reynolds depende da escala de velocidade adotada

(Ahlers et al., 2009). Por exemplo, (3.34) não deve ser válido para pequenos valores de Ra , situação em que o empuxo possivelmente não é a principal aceleração vertical. Segundo a teoria bem aceita de Grossmann e Lohse (2000), referida neste texto como teoria GL, tal escalonamento é verdadeiro no chamado regime de Kraichnan, no qual o número de Rayleigh é elevado. De forma geral, se for possível medir valores típicos da velocidade adimensional, $\mathcal{U}^* = \mathcal{U} H \alpha^{-1}$, pode-se obter o número de Reynolds (sem fazer nenhuma hipótese sobre o regime de escoamento) através de

$$Re = \frac{\mathcal{U}^* \alpha H}{H \nu} = \frac{\mathcal{U}^*}{Pr}. \quad (3.35)$$

Em situações em que (3.34) é válido, a ordem de magnitude da velocidade adimensional é $\mathcal{U}^* \sim \sqrt{RaPr}$. Isso confirma que a velocidade adimensional não precisa ser de ordem unitária, conforme comentado anteriormente. Além disso, Davidson (2004, p. 327) indica que, em turbulência isotrópica, a relação de ordem de magnitude entre o número de Reynolds baseado nas macroescalas e o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor λ_T , $Re_T \equiv \mathcal{U} \lambda_T / \nu$, é dada por

$$Re_T \sim \sqrt{15} Re^{1/2}.$$

A teoria GL também fornece a relação entre o número de Nusselt, Nu_θ , e os números de Rayleigh e de Prandtl. Segundo Ahlers et al. (2009), Nu_θ é definido como

$$Nu_\theta \equiv \frac{\langle \wp c_p W \Theta - \wp c_p \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z} \rangle_{x,t}}{\wp c_p \alpha \Delta \Theta H^{-1}}. \quad (3.36)$$

O numerador do lado direito de (3.36) é igual à média no tempo e na direção horizontal (denotada por $\langle \cdot \rangle_{x,t}$), calculada para qualquer posição z , do fluxo de calor total (via advecção e difusão) na direção vertical. Já o fator de adimensionalização no denominador é igual ao fluxo de calor vertical na situação estática, caso em que $Nu_\theta = 1$.

O terceiro parâmetro adimensional independente governando o problema em questão, o número de Lewis, é a razão entre as difusividades moleculares dos escalares. Este é o parâmetro a ser variado para se estudar a similaridade entre escalares, pois é o único fator diferindo nas equações (3.31) e (3.32). O análogo ao número de Prandtl para o escalar passivo é o número de Schmidt:

$$Sc \equiv \frac{\nu}{\kappa} = \frac{Pr}{Le}. \quad (3.37)$$

Também é possível definir o número de Nusselt do escalar passivo, de maneira análoga a (3.36), como

$$Nu_q \equiv \frac{\langle \wp W Q - \wp \kappa \frac{\partial Q}{\partial z} \rangle_{x,t}}{\wp \kappa \Delta Q H^{-1}}.$$

Finalmente, outra quantidade importante é o número de Péclet, que mede a eficiência do transporte advectivo em relação ao transporte molecular de um escalar. Para a temperatura e o escalar passivo, tem-se

$$Pe_\theta \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\alpha} = Re Pr, \quad Pe_q \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\kappa} = Re Sc = \frac{Re Pr}{Le}. \quad (3.38)$$

A tabela 3.1 apresenta um resumo dos parâmetros adimensionais utilizados neste trabalho, assim como suas definições e significados físicos.

Tabela 3.1: Parâmetros adimensionais importantes em RBC com inclusão de um escalar passivo. Todos os parâmetros (com exceção dos dois últimos, referentes à implementação numérica) devem ser função dos quatro primeiros, independentes.

Parâmetro	Definição	Descrição
Razão de aspecto	$\Gamma \equiv \frac{L}{H}$	Comprimento de periodicidade do domínio na coordenada x^* . Parâmetro independente.
Número de Rayleigh	$Ra \equiv \frac{\beta_0 g \Delta \Theta H^3}{\nu \alpha}$	Razão entre forças de empuxo e viscosidade (considerando o efeito da condução de calor). Parâmetro independente.
Número de Prandtl	$Pr \equiv \frac{\nu}{\alpha}$	Variável de estado que mede a importância relativa dos fluxos moleculares de quantidade de movimento e de calor. Parâmetro independente.
Número de Lewis	$Le \equiv \frac{\kappa}{\alpha}$	Razão entre difusividades moleculares dos escalares a ser variada para avaliar a similaridade entre os mesmos. Parâmetro independente.
Número de Reynolds	$Re \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\nu}$	Razão entre forças inerciais e viscosas que mede intensidade da turbulência no escoamento. Utilizado com subscritos T e η quando baseado nas microescalas de Taylor e Kolmogorov, respectivamente.
Número de Nusselt	$Nu_\theta \equiv \frac{\langle \wp c_p W \Theta - \wp c_p \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z} \rangle_{x,t}}{\wp c_p \alpha \Delta \Theta H^{-1}}$	Razão entre o fluxo total de calor na direção vertical e o fluxo apenas devido à condução.
Número de Nusselt do escalar passivo	$Nu_q \equiv \frac{\langle \wp W Q - \wp \kappa \frac{\partial Q}{\partial z} \rangle_{x,t}}{\wp \kappa \Delta Q H^{-1}}$	Razão entre o fluxo total do escalar passivo na direção vertical e o fluxo molecular.
Número de Schmidt	$Sc \equiv \frac{\nu}{\kappa}$	Análogo ao número de Prandtl para o escalar passivo, mede importância relativa entre fluxos moleculares de quantidade de movimento e de tal escalar.
Número de Péclet da temperatura	$Pe_\theta \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\alpha}$	Razão entre transportes advectivo e molecular de calor.
Número de Péclet do escalar passivo	$Pe_q \equiv \frac{\mathcal{U} H}{\kappa}$	Razão entre transportes advectivo e molecular do escalar passivo.
Número de Péclet da diferença entre dois escalares	$Pe_{\Delta\theta q} \equiv \frac{Re Pr}{10^{ \log Le }}$	Mede a importância relativa da intensidade da turbulência e da diferença entre as difusividades moleculares dos escalares.
Número de Courant	$Co \equiv \frac{\mathcal{U}^* \Delta t}{h}$	Razão entre distância percorrida por partícula de fluido em um passo de tempo e espessura da malha numérica.
Número de Fourier	$Fo \equiv \frac{\mathcal{D} \Delta t}{h^2}$	Razão entre dispersão provocada pela difusão molecular e área de um elemento da malha numérica.

3.2.4 Formulação vorticidade–função corrente

De acordo com [Kundu et al. \(2016, p. 250\)](#), a maneira mais conveniente de se resolver problemas bidimensionais incompressíveis numericamente é utilizar a formulação vorticidade–função corrente, como foi feito no presente estudo. Define-se uma função corrente Ψ^* tal que

$$U^* \equiv -\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*}, \quad W^* \equiv \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*}, \quad (3.39)$$

de maneira que a equação da continuidade é satisfeita automaticamente. Também define-se o vetor vorticidade Ω^* como sendo o rotacional de \mathbf{U}^* , cuja única componente não nula aponta na direção y^* , e é igual a

$$\Omega^* = \frac{\partial U^*}{\partial z^*} - \frac{\partial W^*}{\partial x^*} = -\nabla^{*2} \Psi^*, \quad (3.40)$$

em que ∇^{*2} é o laplaciano adimensional bidimensional no plano x^*z^* . Derivando a equação (3.27) em relação a z^* e (3.28) em relação a x^* e tomando a diferença entre os resultados, obtém-se uma equação para a conservação da quantidade de movimento angular em termos da vorticidade:

$$\frac{D\Omega^*}{Dt^*} = -\text{RaPr} \frac{\partial \Theta^*}{\partial x^*} + \text{Pr} \nabla^{*2} \Omega^*. \quad (3.41)$$

Neste processo, reduz-se o número de equações a serem resolvidas e a pressão é eliminada. A solução numérica das equações (3.31), (3.32), (3.39)–(3.41) é discutida no capítulo 4.

3.3 Condições inicial e de contorno

3.3.1 Condições de contorno

O domínio do problema teórico de Rayleigh-Bénard é infinito na direção horizontal; portanto, não possui fronteiras nesta direção. Entretanto, para que o mesmo seja resolvido computacionalmente, é necessário que o seu domínio seja truncado de maneira a possuir comprimento L . Em termos de variáveis adimensionais, o domínio pode ser visto como um retângulo de lados 1 e $\Gamma = L/H$, a razão de aspecto. Desta forma, Γ torna-se um quarto parâmetro adimensional independente dos demais governando o problema. Em convecção de Rayleigh-Bénard teórica, $\Gamma \rightarrow \infty$, e para que a simulação computacional se aproxime desta situação, é necessário minimizar os efeitos do truncamento do domínio utilizando Γ suficientemente elevado.

Além disso, são aplicadas condições de contorno periódicas na direção x^* tal que, para qualquer função f das variáveis que descrevem o escoamento,

$$f(x^* + \Gamma) = f(x^*), \quad \forall x^* \in \mathbb{R}.$$

Em outras palavras, as posições x^* e $x^* + \Gamma$ passam a ser equivalentes $\forall x^* \in \mathbb{R}$. Assim, pode-se imaginar que as extremidades esquerda e direita do domínio são unidas de tal forma a obter-se um cilindro em cuja superfície lateral ocorre o escoamento, o que elimina as fronteiras na direção horizontal e possivelmente reduz o efeito de confinamento, nos aproximando do que seria a simulação de um domínio infinito em x^* .

Condições de contorno periódicas são bastante comuns em DNS, pois, historicamente, várias simulações deste tipo utilizam métodos espectrais. Em RBC, alguns estudos, tais como [Grötzbach \(1983\)](#), utilizam condições de contorno periódicas. Já [Liu et al. \(2003\)](#), por exemplo, utilizam condições de contorno de Dirichlet e de Neumann na direção horizontal.

Na direção vertical, adota-se a condição de não-penetração sobre as placas,

$$W^* = \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} = 0, \quad z^* = 0, z^* = 1, \quad (3.42)$$

e de tensão nula para a componente horizontal da velocidade, tal que

$$\frac{\partial U^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} = 0, \quad z^* = 0, z^* = 1. \quad (3.43)$$

Esta condição equivale a uma situação teórica em que ambas as superfícies superior e inferior do fluido são livres de atrito, o que pode ser obtido, por exemplo, lubrificando-se as placas, de maneira a torná-las lisas. Esta é a condição de contorno que deve ser utilizada para se obter as equações de [Lorenz \(1963\)](#), como também foi feito por [Hepworth \(2014\)](#), por exemplo. A condição de ausência de cisalhamento nas placas simplifica o problema pois, sabendo que (3.42) vale para todo x^* , pode-se utilizar (3.43) para escrever

$$-\nabla^{*2} \Psi^* = \Omega^* = 0, \quad z^* = 0, z^* = 1$$

sobre as placas. Nesta situação, a condição de contorno para a vorticidade é bem definida numericamente, o que não ocorre quando é adotada a condição de não-deslizamento para U^* , situação em que $\Omega^* = \partial U^* / \partial z^* \neq 0$ nas placas. Neste caso, [Briley \(1971\)](#) e [Liu et al. \(2003\)](#), por exemplo, propõem aproximações numéricas de quarta ordem para a vorticidade nos contornos.

Uma consequência da condição (3.42) é que a função corrente possui um valor constante sobre cada placa. Sabe-se que a diferença entre tais valores é igual à vazão (por unidade de área em $y^* z^*$) através de uma seção vertical (com x^* constante) entre as placas. Como não há nenhum mecanismo externo (tal como uma bomba, por exemplo) forçando o escoamento na direção horizontal, é razoável supor que esta vazão é nula. Assim, a função corrente deve possuir o mesmo valor em ambas as placas. Dado que os valores absolutos da função corrente não possuem significado físico, pois a mesma é definida em termos das suas derivadas, arbitrase

$$\Psi^* = 0, \quad z^* = 0, z^* = 1.$$

Quanto aos escalares, para que seus valores sobre as placas sejam constantes e iguais àqueles mantidos por mecanismos externos, é necessário que suas flutuações de Boussinesq sejam nulas:

$$\begin{aligned} \Theta'^* &= 0, & z^* &= 0, z^* = 1, \\ Q'^* &= 0, & z^* &= 0, z^* = 1. \end{aligned}$$

Em resumo, todas as variáveis que aparecem no sistema (3.31), (3.32), (3.39)–(3.41) possuem condições de contorno homogêneas de Dirichlet na direção vertical, com exceção de U^* , que possui condições de contorno homogêneas de Neumann.

3.3.2 Perturbação inicial e estabilidade térmica

Há dois critérios que devem ser satisfeitos para que haja movimento em RBC. Primeiramente, é necessário que o número de Rayleigh seja suficientemente elevado, de forma que o gradiente vertical de temperatura produza uma situação de instabilidade em que uma porção de fluido deslocada de sua posição de equilíbrio não tende a retornar à mesma. Além disso, o estado hidrostático deve ser perturbado; se as flutuações em relação a este estado forem inicialmente

nulas, o sistema de equações de Boussinesq sempre produz a solução trivial, independentemente do valor de Ra . Tal perturbação pode ser interpretada como um deslocamento das porções de fluido de suas posições de equilíbrio. Apenas uma perturbação inicial sobre o campo do escalar passivo não é capaz de produzir movimento.

Sendo assim, arbitra-se utilizar uma condição inicial aleatória para Θ^* , que em cada ponto do domínio segue uma distribuição uniforme contínua entre $-0,001$ e $0,001$. Tais valores são relativamente pequenos (em módulo) quando comparados aos valores típicos das flutuações em RBC, de tal forma que não são impostos gradientes excessivamente elevados e o algoritmo numérico mantém-se estável. Para o restante das variáveis, adotou-se uma condição inicial nula. Condições iniciais aleatórias são utilizadas em RBC em diversos estudos, como por exemplo em Grötzbach (1983), pois aumentam a garantia de que quaisquer estruturas se formem naturalmente, e não sejam pré-determinadas por algum padrão imposto a princípio.

Para determinar os valores necessários do número de Rayleigh para que haja movimento, é realizada uma análise de estabilidade linear seguindo o procedimento de Chandrasekhar (1970, cap. 2). Considerando que as perturbações inicialmente impostas sobre o equilíbrio hidrostático são suficientemente pequenas, os termos não-lineares podem ser desprezados para t^* pequeno (antes que as perturbações se amplifiquem) por serem de ordem superior. Tomando a derivada segunda em relação a x^* da equação da energia (3.31) linearizada e multiplicando o resultado por Ra , tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(Ra \frac{\partial^2 \Theta'^*}{\partial x^{*2}} \right) = Ra \frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \nabla^{*2} \left(Ra \frac{\partial^2 \Theta'^*}{\partial x^{*2}} \right). \quad (3.44)$$

Para expressar as derivadas de Θ'^* em termos de funções de W^* e eliminar Θ'^* de (3.44), deriva-se em relação a x^* a equação da vorticidade (3.41) linearizada, notando que a derivada da vorticidade em relação a x^* é

$$\frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{\partial U^*}{\partial z^*} - \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right) = \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\partial U^*}{\partial x^*} \right) - \frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} = -\nabla^{*2} W^*,$$

devido à equação da continuidade (3.26). O resultado é

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\nabla^{*2} W^*) = Ra Pr \frac{\partial^2 \Theta'^*}{\partial x^{*2}} + Pr \nabla^{*4} W^*.$$

Combinando este resultado com a equação (3.44), tem-se uma equação somente para W^* :

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left[\frac{1}{Pr} \frac{\partial (\nabla^{*2} W^*)}{\partial t^*} - \nabla^{*4} W^* \right] = Ra \frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \nabla^{*2} \left[\frac{1}{Pr} \frac{\partial (\nabla^{*2} W^*)}{\partial t^*} - \nabla^{*4} W^* \right]. \quad (3.45)$$

Ainda para t^* pequeno, procura-se uma solução em série de Fourier na forma

$$W^* = \sum_{n=1}^{\infty} B_n e^{\sigma t^*} \sin(\pi a x^*) \sin(n \pi z^*). \quad (3.46)$$

Tal série atende às condições de contorno homogêneas nas placas e periódicas em x^* sempre que o número de onda a for da forma $2m\Gamma^{-1}$, $m \in \mathbb{Z}$. A condição de estabilidade é dada por σ , que é positivo em situações instáveis e negativo em situações estáveis, determinando se a perturbação sobre W^* cresce exponencialmente ou tende a zero ao longo do tempo. A condição de transição é dada por $\sigma = 0$. Note que, nesta situação, todas as derivadas temporais de funções f de W^* se anulam, pois

$$\frac{\partial}{\partial t^*} [f(W^*)] = f'(W^*) \frac{\partial W^*}{\partial t^*} = \sigma f'(W^*) W^*.$$

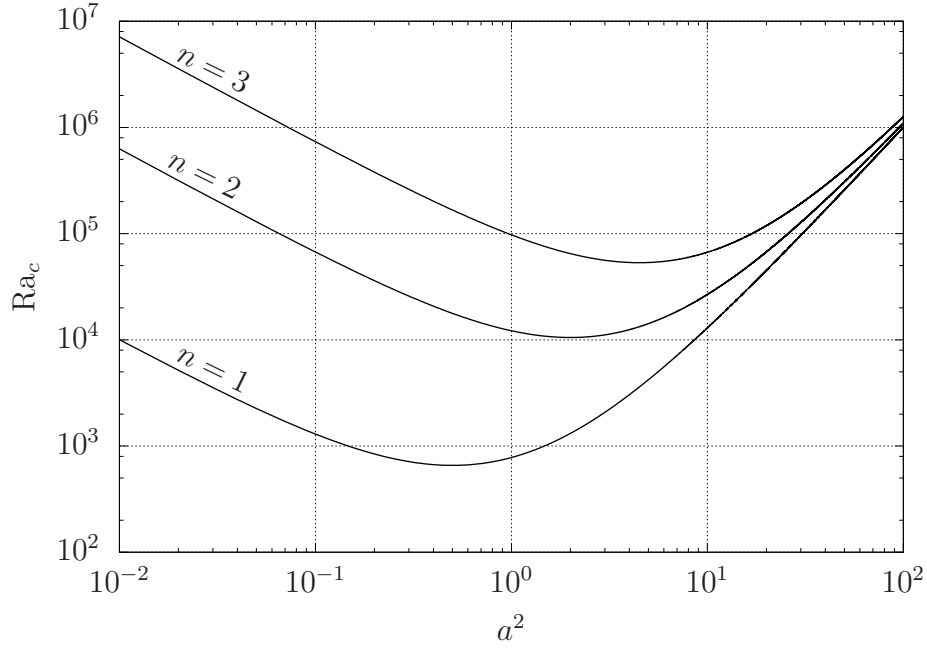


Figura 3.2: Valores críticos do número de Rayleigh (aqueles que instabilizam a solução hidrostática) em função dos números de onda das perturbações impostas.

Na condição de transição, o número de Rayleigh possui o valor crítico $Ra = Ra_c$ a ser determinado. Substituindo a série de Fourier para W^* com $\sigma = 0$ em (3.45):

$$\begin{aligned} Ra_c \frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} &= \nabla^{*6} W^*, \\ -Ra_c \pi^2 a^2 W^* &= -\pi^6 (a^2 + n^2)^3 W^*, \\ Ra_c &= \frac{\pi^4 (n^2 + a^2)^3}{a^2}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

É importante perceber que, segundo a análise desenvolvida, perturbações com diferentes comprimentos de onda são instáveis para diferentes números de Rayleigh (figura 3.2). Este valor crítico é mínimo para $n = 1$ e $a^2 = 0,5$, situação em que $Ra_c = 27\pi^4/4 \approx 657,51$. Este resultado foi primeiramente obtido por [Rayleigh \(1916\)](#), e é frequentemente utilizado para definir o parâmetro

$$r = \frac{Ra}{Ra_c}, \quad (3.48)$$

que é superior à unidade quando a solução hidrostática pode ser instável. O número de Rayleigh necessário para instabilizar a condição inicial aleatória adotada no presente estudo deve ser determinado numericamente. Não foi utilizada uma condição inicial da forma (3.46) para evitar a imposição de padrões no escoamento.

3.4 Equações de Lorenz

Nesta seção, o sistema de equações de [Lorenz \(1963\)](#), um dos modelos mais simples descrevendo RBC, é obtido a partir de uma expansão em série de Fourier das variáveis que descrevem o escoamento, procedimento inicialmente proposto por [Saltzman \(1962\)](#).

3.4.1 Expansão em séries de Fourier

Considere uma função real $F(x, z, t)$ definida para $x \in \mathbb{R}$, $0 \leq z \leq H$ e $t \geq 0$, com condições de contorno homogêneas de Dirichlet em $z = 0, H$. Para tal função propõe-se uma expansão em série de Fourier bidimensional em x e em z , e permite-se que os coeficientes sejam funções do tempo (Saltzman, 1962). Uma série de Fourier desta forma é adequada para representar Θ^* , Q'^* e Ψ^* , e o restante das variáveis físicas podem ser obtidas a partir das derivadas de Ψ^* .

O ponto de partida é a forma complexa

$$F(x, z, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{C}_{m,n}(t) \exp \left[2\pi i \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z} \right) \right], \quad (3.49)$$

em que $\mathcal{C}_{m,n} = \mathcal{A}_{m,n} + i\mathcal{B}_{m,n}$ é o m, n -ésimo coeficiente complexo, $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária e os comprimentos de onda fundamentais são $L_x = 2H/k$ (em que k é o número de onda horizontal) e $L_z = 2H$. O fato de F ser uma função real resulta nas seguintes relações para as partes real e imaginária dos coeficientes:

$$\mathcal{A}_{m,n} = \mathcal{A}_{-m,-n}, \quad \mathcal{B}_{m,n} = -\mathcal{B}_{-m,-n}.$$

É possível separar a série (3.49) em vários somatórios com alguma simetria em seus índices, tornando adequada a aplicação das relações acima e possibilitando diversas simplificações algébricas. O resultado é a forma trigonométrica da série de Fourier de F .

A exigência de que condições de contorno homogêneas na direção vertical sejam satisfeitas leva a outro par de relações entre os coeficientes:

$$\mathcal{A}_{m,n} = -\mathcal{A}_{-m,n}, \quad \mathcal{B}_{m,n} = \mathcal{B}_{-m,n},$$

possibilitando simplificações adicionais na forma trigonométrica da série. Reescalando os coeficientes, o resultado final é uma série na forma

$$F(x^*, z^*, t^*) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} [\mathcal{A}_{m,n} \sin(m\pi kx^*) \sin(n\pi z^*) + \mathcal{B}_{m,n} \cos(m\pi kx^*) \sin(n\pi z^*)]. \quad (3.50)$$

A obtenção de (3.50) a partir de (3.49) é feita em detalhes em Rodakovski (2016).

3.4.2 Seleção de modos

Saltzman (1962) usou séries da forma (3.50) para representar Ψ^* e Θ^* . As séries foram truncadas para conter apenas os coeficientes $\mathcal{A}_{3,1}$, $\mathcal{A}_{4,1}$ e $\mathcal{A}_{1,2}$ para Ψ^* , e apenas os coeficientes $\mathcal{B}_{3,1}$, $\mathcal{B}_{4,1}$, $\mathcal{B}_{1,2}$ e $\mathcal{B}_{0,2}$ para Θ^* . Substituindo tais séries nas equações de Boussinesq (3.31) e (3.41), sendo as componentes da velocidade e a vorticidade obtidas das derivadas da série de Fourier da função corrente, e igualando os fatores multiplicando as mesmas combinações de funções trigonométricas em ambos os lados das equações resultantes, Saltzman (1962) obteve um sistema de 7 equações diferenciais ordinárias (EDOs) para os coeficientes das séries de Fourier. Este sistema foi resolvido numericamente, e o autor verificou que, para determinados valores do número de Rayleigh, quatro coeficientes tendem a zero após certo tempo, com exceção de três coeficientes que permanecem oscilando de forma não-periódica: $\mathcal{A}_{3,1}$ para Ψ^* e $\mathcal{B}_{3,1}$ e $\mathcal{B}_{0,2}$ para Θ^* .

Lorenz (1963) argumentou que as mesmas soluções teriam sido obtidas se as séries fossem truncadas desde o princípio de maneira a conter apenas esses três coeficientes, e propôs

$$\Psi^* = A(t^*) \sin(\pi a x^*) \sin(\pi z^*), \quad (3.51)$$

$$\Theta^* = B(t^*) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*) - C(t^*) \sin(2\pi z^*), \quad (3.52)$$

em que os coeficientes foram renomeados como $A = \mathcal{A}_{3,1}$, $B = \mathcal{B}_{3,1}$ e $C = -\mathcal{B}_{0,2}$, e o número de onda foi reescalado para $a = 3k$, tornando-se equivalente ao número de onda da série (3.46). De acordo com Lorenz (1963), A é proporcional à intensidade do movimento, B é uma medida da diferença de temperatura entre correntes de fluido ascendentes e descendentes, de forma que o produto AB é positivo quando fluido quente está subindo e fluido frio está descendo, e C corresponde ao desvio do perfil de temperatura da linearidade, com valores positivos indicando a ocorrência de fortes gradientes verticais próximos às placas. Substituindo as séries (3.51) e (3.52) na equação da vorticidade (3.41), encontra-se

$$\frac{dA}{dt^*} = \frac{a\text{RaPr}}{\pi(1+a^2)} B - \text{Pr}\pi^2(1+a^2) A. \quad (3.53)$$

Já a substituição das séries na equação da energia (3.31) resulta em

$$\begin{aligned} \left[\frac{dB}{dt^*} - \pi a A - 2\pi^2 a A C \cos(2\pi z^*) + \pi^2(1+a^2) B \right] \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*) \\ - \left[\frac{dC}{dt^*} - \frac{\pi^2 a}{2} A B + 4\pi^2 C \right] \sin(2\pi z^*) = 0. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Para que as equações de Lorenz sejam obtidas, é preciso avaliar o termo que contém $\cos(2\pi z^*)$ na equação (3.54) no ponto intermediário entre as placas, $z^* = 0,5$. Note que trata-se de uma função trigonométrica anômala, que não ocorre nas séries de Fourier (3.51) e (3.52). Assim, os termos entre colchetes deixam de fazer referência às coordenadas espaciais, e para que a equação seja válida em qualquer ponto do domínio, é necessário que os mesmos se anulem. O resultado é o par de equações não-lineares:

$$\frac{dB}{dt^*} = \pi a A - 2\pi^2 a A C - \pi^2(1+a^2) B, \quad (3.55)$$

$$\frac{dC}{dt^*} = \frac{\pi^2 a}{2} A B - 4\pi^2 C. \quad (3.56)$$

Chen e Price (2006) também eliminam funções trigonométricas anômalas ao generalizar as equações de Lorenz para cinco coeficientes.

As equações de Lorenz (3.53), (3.55) e (3.56) também podem ser obtidas a partir do sistema, dado por Saltzman (1962), de 52 EDOs para 52 coeficientes (aqueles tais que $1 \leq m \leq 6$ e $1 \leq n \leq 2$, e também $\mathcal{B}_{0,n}$ com $1 \leq n \leq 4$ somente para Θ^*), zerando quaisquer coeficientes que não sejam $\mathcal{A}_{3,1}$ para Ψ^* e $\mathcal{B}_{3,1}$ e $\mathcal{B}_{0,2}$ para Θ^* , e aplicando algumas relações de escala. Além disso, a forma do sistema de equações originalmente dada por Lorenz (1963) difere das equações (3.53), (3.55) e (3.56) por alguns fatores de escala. Esta última forma foi preferida no presente estudo devido à maior proximidade dos coeficientes não-reescalados das variáveis físicas originais, obtidas através das séries de Fourier (3.51) e (3.52).

O termo que contém $\cos(2\pi z^*)$ em (3.54) tem origem no termo de advecção vertical em (3.31). Conforme destacado por Liu et al. (2003), sua avaliação em $z^* = 0,5$ é equivalente a adicionar um termo forçante f , dado por

$$f = -2\pi^2 a A C [1 + \cos(2\pi z^*)] \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*), \quad (3.57)$$

ao lado direito de (3.31). Assim, f pode ser visto como uma medida do desvio da solução das equações de Lorenz em relação a RBC, tanto mais importante quanto maiores os valores absolutos de A e C . Além disso, Saltzman (1962) destaca que as séries de Fourier truncadas (3.51) e (3.52) são adequadas para descrever RBC em situações de baixo número de Rayleigh. Evidências experimentais disso foram obtidas por Danforth (2001). Entretanto, quando Ra é elevado, interações não-lineares entre os modos fazem com que A , B e C deixem de ser suficientes para descrever o escoamento. Assim, em situações de elevada instabilidade térmica, mais modos além daqueles representados em (3.51) e (3.52) se tornam importantes, de tal forma que as soluções das equações de Lorenz devem se afastar do que realmente ocorre em RBC. A limitação do conteúdo físico de (3.53), (3.55) e (3.56) a baixos números de Rayleigh não foram um problema para Lorenz (1963), cujo interesse principal não era descrever RBC com acurácia, e sim estudar o efeito da extrema sensibilidade às condições iniciais de fenômenos não-lineares sobre a sua previsibilidade utilizando o sistema dinâmico mais simples que pudesse encontrar, o que deu origem à Teoria do Caos (Mottet e Campbell, 2013).

Em um espaço de fase, as equações de Lorenz possuem três pontos críticos (em que as derivadas de A , B e C se anulam simultaneamente), correspondentes a soluções permanentes. O primeiro deles é a origem, equivalente à solução hidrostática, estável quando r dado por (3.48) é inferior à unidade. Os outros dois pontos críticos são $(A_\infty, B_\infty, C_\infty)$ e $(-A_\infty, -B_\infty, C_\infty)$, em que

$$A_\infty = \frac{2}{a} \sqrt{(1 + a^2)(r - 1)}, \quad (3.58)$$

$$B_\infty = \frac{2}{\pi r} \sqrt{\frac{r - 1}{1 + a^2}}, \quad (3.59)$$

$$C_\infty = \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{r}\right). \quad (3.60)$$

Tais pontos correspondem a situações de convecção estacionária diferindo no sentido do escoamento. Chen e Price (2006) destacam que RBC possui infinitas soluções permanentes diferindo quanto à posição horizontal das estruturas convectivas, enquanto o truncamento das séries de Fourier faz com que as equações de Lorenz admitam apenas duas destas soluções. Soluções permanentes das equações de Lorenz são estáveis se $1 < r < r_c$, em que

$$r_c = \frac{\text{Pr}(\text{Pr} + b + 3)}{\text{Pr} - b - 1}, \quad b = \frac{4}{1 + a^2}, \quad (3.61)$$

(Lorenz, 1963). Para $a = 1/\sqrt{2}$ e $\text{Pr} = 10$, $b = 8/3$ e $r_c = 470/19 \approx 24,74$. As equações de Lorenz possuem soluções não-periódicas para $r > r_c$, e $(A_\infty, B_\infty, C_\infty)$ e $(-A_\infty, -B_\infty, C_\infty)$ passam a ser as coordenadas dos focos dos atratores estranhos que surgem em um espaço de fase nesta situação (Mottet e Campbell, 2013; Rodakoviski, 2016).

Analogamente à temperatura, uma série de Fourier para o escalar passivo pode ser escrita como

$$Q^* = D(t^*) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*) - E(t^*) \sin(2\pi z^*). \quad (3.62)$$

Substituindo-a em (3.32) e aproximando o termo contendo $\cos(2\pi z^*)$ em $z^* = 0,5$ de forma semelhante ao que foi feito anteriormente, obtém-se duas EDOs adicionais similares a (3.55) e (3.56), com os termos difusivos trazendo consigo o número de Lewis:

$$\frac{dD}{dt^*} = \pi a A - 2\pi^2 a A E - \pi^2 (1 + a^2) \text{Le} D, \quad (3.63)$$

$$\frac{dE}{dt^*} = \frac{\pi^2 a}{2} A D - 4\pi^2 \text{Le} E. \quad (3.64)$$

3.5 Equações para o escoamento médio

As não-linearidades das equações de conservação fazem com que escoamentos turbulentos sejam caóticos, o que resulta em sua imprevisibilidade prática. Uma abordagem possível é considerar que os mesmos são eventos aleatórios, de forma que cada realização de um escoamento corresponde a um elemento \tilde{s} de um espaço amostral \mathbb{S} . Busca-se então resultados médios, e não apenas referentes a realizações individuais. Para isso, aplica-se a decomposição de Reynolds, que consiste em separar o valor observado de uma variável (aqui representado por F) na soma de seu valor esperado $\langle F \rangle$ (a média probabilística, determinística) e uma flutuação f aleatória (neste texto indicada por letras minúsculas), na forma

$$F(\mathbf{x}, t; \tilde{s}) = \langle F(\mathbf{x}, t) \rangle + f(\mathbf{x}, t; \tilde{s}). \quad (3.65)$$

A esperança matemática é calculada como a integral de F ponderada pela medida de probabilidade de cada elemento \tilde{s} sobre o espaço amostral \mathbb{S} , conforme definido pela Teoria da Medida (Athreya e Lahiri, 2006, p. 193). Consequentemente, variáveis determinísticas (que não dependem de \tilde{s} , tais como a média probabilística) são tratadas como constantes nesta integral, que também permuta com derivadas espaciais e temporais. Além disso, as flutuações turbulentas possuem médias nulas. Estes resultados, conhecidos como “postulados de Reynolds”, são utilizados para obter equações para o escoamento médio.

3.5.1 Fluxos turbulentos

Aplicando a decomposição de Reynolds na equação da continuidade com aproximação de Boussinesq (3.21) e tomando a média do resultado, conclui-se que

$$\frac{\partial \langle U_i \rangle}{\partial x_i} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0.$$

Fazendo o mesmo procedimento na equação da conservação da quantidade de movimento com aproximação de Boussinesq (3.22), e usando o resultado acima, encontra-se

$$\frac{\overline{D} \langle U_i \rangle}{\overline{D}t} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle P' \rangle}{\partial x_i} - \beta_0 \langle \Theta' \rangle g_i + \nu \frac{\partial^2 \langle U_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \langle u_i u_j \rangle}{\partial x_j}, \quad (3.66)$$

em que $\overline{D}/\overline{D}t$ denota a derivada material calculada com o campo de velocidade médio. A equação (3.66) é muito semelhante à (3.22) com valores médios no lugar dos valores observados, exceto pela presença adicional do último termo do lado direito de (3.66). Este termo é a divergência da covariância entre componentes da velocidade, a forma através da qual flutuações turbulentas afetam o escoamento médio, o que ocorre devido às não-linearidades de (3.22). Portanto, a covariância $\langle u_i u_j \rangle$ é um fluxo turbulento de quantidade de movimento, e define o i, j -ésimo elemento do tensor de tensões de Reynolds.

De forma similar ao que foi feito anteriormente, aplica-se a decomposição de Reynolds nas equações dos escalares (3.23) e (3.15), e toma-se a média do resultado. Usando novamente o fato de que o campo de flutuações de velocidade é solenoidal, encontra-se as equações determinísticas

$$\frac{\overline{D} \langle \Theta \rangle}{\overline{D}t} = \alpha \frac{\partial^2 \langle \Theta \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \langle u_i \theta \rangle}{\partial x_i}, \quad (3.67)$$

$$\frac{\overline{D} \langle Q \rangle}{\overline{D}t} = \kappa \frac{\partial^2 \langle Q \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \langle u_i q \rangle}{\partial x_i}. \quad (3.68)$$

Assim como ocorre para a equação da conservação da quantidade de movimento, as não-linearidades de (3.23) e (3.15) fazem com que flutuações turbulentas impactem resultados médios através da divergência dos fluxos turbulentos dos escalares, dados pelas covariâncias $\langle u_i \theta \rangle$ e $\langle u_i q \rangle$.

O problema da abordagem probabilística da turbulência é o surgimento de momentos de ordem superior nas equações para o escoamento médio. Estes momentos são novas incógnitas para as quais é necessário escrever equações adicionais, que por sua vez podem ser obtidas a partir dos princípios de conservação. Contudo, equações para momentos de ordem n contêm termos envolvendo momentos de ordem $n + 1$, de tal forma que há sempre mais incógnitas do que equações disponíveis. Modelos de fechamento são aqueles que parametrizam momentos de ordem $n + 1$ em termos de momentos de ordem inferior. Inspirado nas leis de Newton (3.7), de Fourier (3.11) e de Fick (3.14), um dos modelos de fechamento mais simples supõe a existência de difusividades turbulentas K_m , K_θ e K_q tais que

$$\begin{aligned}\langle u_i u_j \rangle &= -K_m \left(\frac{\partial \langle U_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle U_j \rangle}{\partial x_i} \right), \\ \langle u_i \theta \rangle &= -K_\theta \frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial x_i}, \\ \langle u_i q \rangle &= -K_q \frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial x_i}.\end{aligned}\tag{3.69}$$

Um dos objetivos do presente estudo é analisar a dependência do transporte turbulento em relação à quantidade transportada. A analogia de Reynolds, por exemplo, é uma hipótese bem conhecida que, em sua forma original, supõe que a difusividade turbulenta de quantidade de movimento K_m é proporcional à difusividade turbulenta de calor K_θ . Neste estudo, a simulação numérica direta de RBC com a inclusão de um escalar passivo permite avaliar a similaridade entre escalares através da correlação entre θ e q e a relação entre os fluxos $\langle u_i \theta \rangle$ e $\langle u_i q \rangle$ para diferentes números de Lewis.

3.5.2 Energia cinética e taxa de dissipação médias

Considerações estatísticas sobre a equação da energia cinética revelam importantes padrões de transferência de energia em um escoamento, os quais estão intimamente ligados às micro-escalas da turbulência. A energia cinética (por unidade de massa) média de um escoamento é igual à energia cinética associada à velocidade média, $\langle U_i \rangle \langle U_i \rangle / 2$, somada a uma energia cinética associada às flutuações de velocidade, chamada de energia cinética da turbulência (TKE, do inglês *turbulence kinetic energy*), dada por $\langle u_i u_i / 2 \rangle$:

$$\left\langle \frac{U_i U_i}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle U_i \rangle \langle U_i \rangle + \left\langle \frac{u_i u_i}{2} \right\rangle.\tag{3.70}$$

A TKE não é uma flutuação turbulenta, mas sim um resultado determinístico associado ao escoamento médio, existente graças ao fato da energia cinética ser uma função não-linear das componentes da velocidade.

A média da taxa de dissipação da energia cinética, $\tau_{ij} S_{ij}$, também pode ser separada em uma fração ϵ_M associada ao escoamento médio e uma parcela ϵ associada às flutuações (que assim como a TKE, não é uma flutuação turbulenta, mas sim um resultado médio). Aplicando a aproximação de Boussinesq em (3.7) e tomando a média do resultado, encontra-se

$$\frac{1}{\rho_0} \langle \tau_{ij} S_{ij} \rangle = \underbrace{2\nu \langle S_{ij} \rangle \langle S_{ij} \rangle}_{\equiv \epsilon_M} + \underbrace{2\nu \langle s_{ij} s_{ij} \rangle}_{\equiv \epsilon}.\tag{3.71}$$

Enquanto ϵ_M é responsável pela dissipação da energia cinética associada à velocidade média, $\langle U_i \rangle \langle U_i \rangle / 2$, ε é a taxa de dissipação da TKE, como pode ser provado escrevendo separadamente equações para $\langle U_i \rangle \langle U_i \rangle / 2$ e para TKE. No primeiro caso, toma-se a equação (3.66) com o termo de empuxo escrito em termos da densidade e o termo viscoso escrito em termos do tensor taxa de deformação para uma apresentação clássica:

$$\frac{\overline{D} \langle U_i \rangle}{\overline{D} t} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle P' \rangle}{\partial x_i} + \frac{\langle \rho' \rangle}{\rho_0} g_i + 2\nu \frac{\partial \langle S_{ij} \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle u_i u_j \rangle}{\partial x_j}. \quad (3.72)$$

Multiplicando esta equação por $\langle U_i \rangle$, encontra-se uma equação para a energia cinética associada às velocidades médias:

$$\frac{\overline{D}}{\overline{D} t} \left(\frac{1}{2} \langle U_i \rangle \langle U_i \rangle \right) = \frac{\langle \rho' \rangle}{\rho_0} \langle U_i \rangle g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\langle U_j \rangle \langle P' \rangle}{\rho_0} - \langle u_i u_j \rangle \langle U_i \rangle + 2\nu \langle U_i \rangle \langle S_{ij} \rangle \right) - \mathcal{P} - \epsilon_M, \quad (3.73)$$

em que

$$\mathcal{P} \equiv -\langle u_i u_j \rangle \frac{\partial \langle U_i \rangle}{\partial x_j}.$$

O primeiro termo do lado direito de (3.73) refere-se ao trabalho da força peso, enquanto os três termos seguintes (entre parênteses) correspondem à redistribuição de energia no interior do meio fluido. Conclui-se que a taxa de dissipação associada às deformações médias, ϵ_M , é responsável pela conversão da energia cinética associada ao escoamento médio, $\langle U_i \rangle \langle U_i \rangle / 2$, em energia interna.

Para se obter uma equação para a TKE, aplica-se a decomposição de Reynolds em (3.22) e subtrai-se a equação (3.72) do resultado, o que leva a uma equação para as flutuações u_i . Tal equação é multiplicada por u_j , e o resultado é somado à equação análoga com os índices i e j invertidos. Tomando-se a média, encontra-se uma equação para as covariâncias $\langle u_i u_j \rangle$, que se reduz à seguinte equação para a TKE quando os índices são igualados:

$$\frac{\overline{D}}{\overline{D} t} \left\langle \frac{u_i u_i}{2} \right\rangle = \frac{g_i}{\rho_0} \langle u_i \rho \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\langle u_j p \rangle}{\rho_0} - \frac{\langle u_i u_i u_j \rangle}{2} + 2\nu \langle u_i s_{ij} \rangle \right) + \mathcal{P} - \varepsilon. \quad (3.74)$$

Analogamente ao que ocorre em (3.73), o primeiro termo do lado direito de (3.74) refere-se ao efeito do empuxo, enquanto os três termos seguintes (entre parênteses) correspondem ao transporte da TKE. O penúltimo termo, \mathcal{P} , aparece com sinais opostos em (3.73) e (3.74); trata-se portanto de uma conversão entre diferentes formas de energia cinética. Dado que, em geral, $\mathcal{P} > 0$ (Pope, 2000, p. 125), este termo é uma fonte em (3.74), sendo por esta razão chamado de produção de TKE. A equação (3.74) prova que ε é a taxa de dissipação da TKE.

Considerando que os gradientes de velocidade nas microescalas são muito mais intensos que os gradientes de velocidade médios nas grandes escalas, suavizados pelo efeito de mistura da turbulência, pode-se escrever

$$\epsilon_M \ll \varepsilon. \quad (3.75)$$

O esquema de transferência de energia está resumido na figura 3.3. Em alguns escoamentos, a principal fonte de TKE é a produção por gradiente médio de velocidade, de maneira que $\varepsilon \sim \mathcal{P}$. Por outro lado, embora (3.75) seja um resultado geral em turbulência, é possível que $\mathcal{P} \ll \varepsilon$. Por exemplo, em RBC, a fonte predominante de TKE é a energia potencial gravitacional, de forma que

$$\varepsilon \sim \frac{g_i}{\rho_0} \langle u_i \rho \rangle.$$

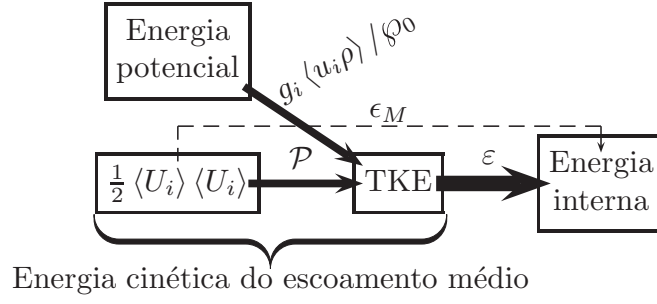


Figura 3.3: A energia cinética associada à velocidade média é pouco dissipada em energia interna e principalmente utilizada para produção de TKE, que por sua vez é dissipada em energia interna a uma taxa elevada devido à intensidade dos gradientes de velocidade na microescala. Em RBC, entretanto, a principal fonte de TKE é a energia potencial.

De maneira semelhante ao que foi feito para a velocidade, é possível encontrar equações para a semi-variância dos escalares. Tomando a diferença entre a equação para uma realização (3.23) e para a média (3.67), encontra-se uma equação para as flutuações de temperatura. Multiplicando o resultado por θ e tomando-se a média novamente, encontra-se a seguinte equação para a semi-variância da temperatura:

$$\frac{\overline{D}}{\overline{D}t} \left\langle \frac{\theta^2}{2} \right\rangle = -\langle u_i \theta \rangle \frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial \langle u_i \theta^2 / 2 \rangle}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial^2 \langle \theta^2 / 2 \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \alpha \left\langle \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (3.76)$$

Os termos do lado direito indicam respectivamente produção, transporte turbulento, transporte difusivo e taxa de dissipação da semi-variância da temperatura. Analogamente, a equação para a semi-variância do escalar passivo é

$$\frac{\overline{D}}{\overline{D}t} \left\langle \frac{q^2}{2} \right\rangle = -\langle u_i q \rangle \frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial \langle u_i q^2 / 2 \rangle}{\partial x_i} + \kappa \frac{\partial^2 \langle q^2 / 2 \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \kappa \left\langle \frac{\partial q}{\partial x_i} \frac{\partial q}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (3.77)$$

3.6 Microescalas da turbulência

3.6.1 Microescalas de Kolmogorov

A taxa de dissipação da TKE possui papel fundamental na determinação das menores escalas em que ocorrem fenômenos relevantes em escoamentos turbulentos, conhecidas como microescalas de Kolmogorov (Pope, 2000, p. 185). Um DNS deve ser capaz de representar estes fenômenos. A ordem de magnitude da taxa de dissipação da TKE é

$$\epsilon \sim \nu \left(\frac{\tilde{u}}{\eta_u} \right)^2, \quad (3.78)$$

em que \tilde{u} e η_u são respectivamente as microescalas de velocidade e de comprimento. Nas microescalas, os gradientes de velocidade são suficientemente elevados para que os termos viscosos da equação de conservação da quantidade de movimento possuam a mesma ordem de magnitude que os termos de inércia. Assim, o escoamento é localmente laminar, e o número de Reynolds definido em termos das microescalas é unitário:

$$\text{Re}_\eta = \frac{\tilde{u} \eta_u}{\nu} \sim 1. \quad (3.79)$$

Resolvendo o sistema (3.78)–(3.79) para η_u e para \tilde{u} , e definindo a microescala de tempo como $\tau_u \equiv \eta_u/\tilde{u}$, encontra-se expressões para as microescalas de Kolmogorov:

$$\eta_u \sim \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}, \quad \tilde{u} \sim (\nu\varepsilon)^{1/4}, \quad \tau_u \sim \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}. \quad (3.80)$$

Observações experimentais indicam que a taxa de dissipação da energia cinética é imposta pelas macroescalas independentemente da viscosidade do escoamento, e possui a seguinte ordem de magnitude (Pope, 2000, p. 183):

$$\varepsilon \approx \frac{1}{\mathcal{L}_0} \langle \tau_{ij} S_{ij} \rangle \sim \frac{\mathcal{U}^3}{\mathcal{L}}, \quad (3.81)$$

em que \mathcal{L} é uma macroescala de comprimento, igual a H no caso de RBC. Portanto, para que a taxa de dissipação possua a ordem de magnitude determinada por (3.81), percebe-se de (3.78) que os gradientes de velocidade nas microescalas devem ser maiores quanto menor a viscosidade do fluido. Consequentemente, as microescalas de comprimento diminuem com um aumento do número de Reynolds. De fato, isto pode ser visto a partir das relações entre as macro e microescalas, obtidas das equações (3.80) e (3.81):

$$\frac{\eta_u}{\mathcal{L}} \sim \text{Re}^{-3/4}, \quad \frac{\tau_u}{\mathcal{T}} \sim \text{Re}^{-1/2}, \quad (3.82)$$

em que $\mathcal{T} \equiv \mathcal{L}/\mathcal{U}$ é a macroescala de tempo, e o número de Reynolds definido em termos das macroescalas.

Uma consequência prática de (3.82) é a limitação de DNS a escoamentos com baixos números de Reynolds. Considere, por exemplo, uma simulação tridimensional em que o domínio é um cubo de aresta \mathcal{L} . Se a espessura da grade é da ordem de η , o número total de pontos de grade é $N^3 \sim \text{Re}^{9/4}$. Caso o algoritmo numérico requeira que, durante um passo de tempo Δt , uma partícula de fluido se mova uma distância inferior à espessura da grade para permanecer estável, o maior valor de Δt permitido é tal que

$$\frac{\mathcal{U} \Delta t}{\eta_u} \sim 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta t}{\mathcal{T}} \sim \text{Re}^{-3/4}.$$

Note que tal condição de estabilidade numérica restringe o passo de tempo além da limitação imposta por (3.82). Portanto, uma simulação de duração da ordem de \mathcal{T} exige que o número de passos de tempo a serem resolvidos seja $N_t \sim \text{Re}^{3/4}$. Assim, o número de operações de ponto flutuante a serem realizadas é da ordem de $N^3 N_t \sim \text{Re}^3$. O crescimento exponencial do custo computacional de DNS com o número de Reynolds faz com que computadores extremamente eficientes sejam necessários para simular até mesmo escoamentos relativamente simples em um tempo aceitável.

As microescalas adimensionais podem ser obtidas a partir de (3.82). A macroescala de comprimento é igual ao fator de adimensionalização adotado, $\mathcal{L} = H$, de forma que

$$\eta_u^* \sim \text{Re}^{-3/4}.$$

Já a microescala de tempo, por consistência, deve ser adimensionalizada pelo fator H^2/α . Assim,

$$\tau_u^* \frac{\mathcal{U} H}{\alpha} \sim \text{Re}^{-1/2} \quad \Rightarrow \quad \tau_u^* \sim \text{Re}^{-3/2} \text{Pr}^{-1}.$$

Adotando a relação de escala (3.34), por exemplo, as microescalas adimensionais podem ser escritas em termos dos números de Rayleigh e de Prandtl como

$$\eta_u^* \sim \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Ra}}\right)^{3/8}, \quad \tau_u^* \sim (\text{Ra}^3 \text{Pr})^{-1/4}. \quad (3.83)$$

3.6.2 Microescalas do escalar passivo

Quando um escalar passivo possui difusividade molecular próxima da viscosidade do fluido, ou seja, $Sc \sim 1$, sua variância é dissipada nas microescalas de Kolmogorov, como ocorre para a energia cinética da turbulência. Entretanto, se a viscosidade do escoamento for maior que a difusividade do escalar ($Sc > 1$), as flutuações de velocidade são dissipadas em uma escala espacial maior que aquela em que são dissipadas as flutuações do escalar; em outras palavras, sua difusão molecular é um fenômeno importante apenas em escalas de comprimento $\eta_q < \eta_u$. Por outro lado, se $Sc < 1$, o escalar é difundido em uma escala de comprimento η_q superior àquela em que as flutuações de velocidade são dissipadas. Em DNS, a espessura da malha deve ser capaz de resolver também as microescalas dos escalares.

De forma geral, pode-se escrever a relação entre as microescalas do escalar e da velocidade na forma

$$\eta_q = Sc^{-n} \eta_u,$$

em que n deve ser determinado em função de Sc . Nas microescalas do escalar, a derivada temporal de Q deve possuir a mesma ordem de magnitude que o termo difusivo em (3.15). Portanto,

$$\eta_q \sim \sqrt{\kappa \tau}, \quad (3.84)$$

em que τ é uma escala de tempo determinada pelo fenômeno mais lento, que é o fator limitante controlando a taxa em que ocorre o processo de difusão (Katul e Liu, 2017). Consequentemente, a escala de comprimento em que a variância do escalar é dissipada depende de qual é o processo físico limitando a sua difusão molecular.

Quando $Sc \gg 1$, a viscosidade do fluido, muito maior que a difusividade do escalar, restringe a taxa de difusão do mesmo. Assim, toda a dissipação da TKE deve ocorrer antes que as estruturas turbulentas atinjam escalas de comprimento em que o escalar é difundido. Logo, a escala de tempo adequada em (3.84) é a microescala de Kolmogorov,

$$\tau_u \sim \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}},$$

e o valor de η_q correspondente é a microescala de Batchelor (Batchelor, 1959):

$$\eta_B \sim \left(\frac{\kappa^2 \nu}{\varepsilon} \right)^{1/4} \sim Sc^{-1/2} \eta_u. \quad (3.85)$$

Já quando $Sc \ll 1$, a difusividade molecular do escalar é muito maior que a viscosidade do fluido, de tal forma que a difusão molecular é importante em escalas de comprimento superiores à escala em que a TKE é dissipada. Assim, a própria difusividade do escalar é o fator que limita a difusão, independentemente da viscosidade do escoamento, e a escala de tempo adequada em (3.84) é a microescala de tempo do escalar,

$$\tau_q \sim \sqrt{\frac{\kappa}{\varepsilon}} \sim Sc^{-1/2} \tau_u. \quad (3.86)$$

O valor de η_q correspondente é a microescala de Obukhov-Corrsin (Obukhov, 1949; Corrsin, 1951):

$$\eta_C \sim \left(\frac{\kappa^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \sim Sc^{-3/2} \eta_u. \quad (3.87)$$

Em resumo, o comportamento assintótico da microescala do escalar é

$$\eta_q \sim \begin{cases} Sc^{-1/2} \eta_u, & Sc \rightarrow \infty, \\ Sc^{-3/2} \eta_u, & Sc \rightarrow 0. \end{cases}$$

Os mesmos resultados podem ser obtidos através do Teorema dos IIs de Buckingham ([Kundu et al., 2016](#), p. 26), tratando as microescalas de comprimento do escalar e da velocidade como grandezas de dimensões físicas distintas, e incluindo a viscosidade do fluido como parâmetro importante apenas quando $Sc \gg 1$ (pois, no caso $Sc \ll 1$, a microescala do escalar ocorre dentro da faixa inercial, em que a viscosidade não é importante).

Supondo que os resultados obtidos nesta seção são igualmente válidos para escalares ativos, a microescala de comprimento para a temperatura η_θ também é dada pelas microescalas de Batchelor (3.85) ou de Obukhov-Corrsin (3.87), trocando-se o número de Schmidt pelo número de Prandtl. De fato, [Chillà e Schumacher \(2012\)](#) indicam que deve-se utilizar a microescala de Batchelor (no lugar da microescala de Kolmogorov) como critério de resolução espacial em DNS de RBC quando $Pr > 1$. Analogamente, a microescala de tempo da temperatura τ_θ é dada por (3.86) com α no lugar de κ , ou Pr no lugar de Sc .

3.7 Análises espectrais

Há diversas funções matemáticas que tornam possível estudar separadamente fenômenos que ocorrem em diferentes escalas em escoamentos turbulentos. Algumas delas, frequentemente empregadas na literatura, são as funções de covariância, funções de estrutura e espectros de energia, discutidas em [Davidson \(2004, p. 88\)](#), por exemplo. Apesar de tais funções poderem ser definidas em termos de coordenadas espaciais para turbulência estatisticamente homogênea, neste texto as mesmas serão definidas para séries temporais medidas em um ponto do espaço para turbulência estatisticamente estacionária. As duas abordagens podem ser relacionadas, ao menos como uma primeira aproximação, através da hipótese da turbulência congelada de Taylor ([Pope, 2000, p. 223](#)).

Um processo estocástico qualquer é dito estatisticamente estacionário se todos os seus momentos forem invariantes em relação a uma translação no tempo. Supondo que todas as variáveis que descrevem um escoamento turbulento são processos estacionários, define-se a função de covariância entre θ e q como

$$R_{\theta q}(\tau) \equiv \langle \theta(t)q(t + \tau) \rangle, \quad (3.88)$$

em que τ é uma separação no tempo. Já o espectro cruzado bilateral entre θ e q é definido como a transformada de Fourier de $R_{\theta q}$:

$$S_{\theta q}(\mathbf{n}) \equiv \hat{R}_{\theta q}(\mathbf{n}) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} R_{\theta q}(\tau) e^{-2\pi i \mathbf{n} \tau} d\tau, \quad \mathbf{n} \in \mathbb{R}, \quad (3.89)$$

em que \mathbf{n} é a frequência cíclica (de tal forma que $2\pi \mathbf{n}$ é a frequência angular).

Como a função de covariância é real, o espectro possui simetria hermitiana, ou seja, $S_{\theta q}(-\mathbf{n}) = S_{\theta q}^*(\mathbf{n})$, em que a estrela denota o conjugado complexo. Consequentemente, a parte real de $S_{\theta q}$ é uma função par, enquanto a parte imaginária de $S_{\theta q}$ é uma função ímpar, e é conveniente definir o espectro unilateral como

$$G_{\theta q}(\mathbf{n}) \equiv \begin{cases} 2S_{\theta q}(\mathbf{n}), & \mathbf{n} \geq 0, \\ 0, & \mathbf{n} < 0. \end{cases} \quad (3.90)$$

Também define-se o coespectro $\text{Co}_{\theta q}$ e o espectro de quadratura $\text{Qu}_{\theta q}$ como a parte real e menos a parte imaginária do espectro unilateral,

$$G_{\theta q}(\mathbf{n}) = \text{Co}_{\theta q}(\mathbf{n}) - i\text{Qu}_{\theta q}(\mathbf{n}), \quad (3.91)$$

de forma que

$$\int_0^\infty \text{Co}_{\theta q}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \int_{-\infty}^\infty S_{\theta q}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \langle \theta q \rangle. \quad (3.92)$$

A equação (3.92) fornece uma interpretação física para o coespectro: sua integral entre duas frequências quaisquer representa a contribuição desta faixa de frequências para a covariância θq . Qualquer outra variável poderia ter sido utilizada nas definições desta seção, de forma que $\text{Co}_{wq}(\mathbf{n})$ indica a importância relativa das diferentes frequências responsáveis pelo fluxo turbulento vertical do escalar passivo, e Co_{uu} descreve a distribuição em frequências da energia cinética da turbulência na direção x . Em particular, funções de autocovariância, obtidas utilizando-se a mesma variável duas vezes em (3.88), são funções pares, o que faz com que os correspondentes autoespectros sejam funções puramente reais.

Graças à desigualdade do espectro cruzado (Bendat e Piersol, 2010, p. 134), a função de coerência, definida por

$$\gamma_{\theta q}^2(\mathbf{n}) = \frac{|G_{\theta q}(\mathbf{n})|^2}{G_{qq}(\mathbf{n})G_{\theta\theta}(\mathbf{n})} = \frac{\text{Co}_{\theta q}^2(\mathbf{n}) + \text{Qu}_{\theta q}^2(\mathbf{n})}{G_{qq}(\mathbf{n})G_{\theta\theta}(\mathbf{n})}, \quad (3.93)$$

é uma quantidade que varia entre 0 e 1 para todo \mathbf{n} , e, portanto, fornece uma medida da correlação entre os escalares separadamente para cada frequência. Contudo, a função de coerência é afetada pelo espectro de quadratura, que por sua vez não contribui para a correlação entre os escalares, como percebe-se de (3.92). Por isso, define-se o coeficiente de correlação espectral como

$$\Upsilon_{\theta q}^2(\mathbf{n}) = \frac{\text{Co}_{\theta q}^2(\mathbf{n})}{G_{qq}(\mathbf{n})G_{\theta\theta}(\mathbf{n})}, \quad (3.94)$$

e tem-se que

$$0 \leq \Upsilon_{\theta q}^2 \leq \gamma_{\theta q}^2 \leq 1.$$

Finalmente, nota-se que o cálculo de um espectro através de sua definição (3.88)–(3.89) é muito custoso computacionalmente. Na prática, o espectro de séries temporais de duração \mathcal{T} é calculado como (Bendat e Piersol, 2010, p. 128)

$$G_{\theta q}(\mathbf{n}) = \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{2}{\mathcal{T}} \left\langle \hat{\theta}^*(\mathbf{n}) \hat{q}(\mathbf{n}) \right\rangle, \quad (3.95)$$

em que $\hat{\cdot}$ denota a transformada de Fourier.

Os espectros teóricos previstos por Batchelor (1959) e Batchelor et al. (1959) para turbulência tridimensional estão representados na figura 3.4. Ocorre uma separação entre as escalas quando $\text{Re} \gg 1$ (então existe uma faixa inercial bem definida) e o número de Prandtl (ou de Schmidt, no caso de um soluto) for muito diferente da unidade. Contudo, destaca-se que o escoamento simulado no presente estudo é bidimensional e, portanto, não se espera encontrar necessariamente espectros com as mesmas inclinações indicadas na figura.

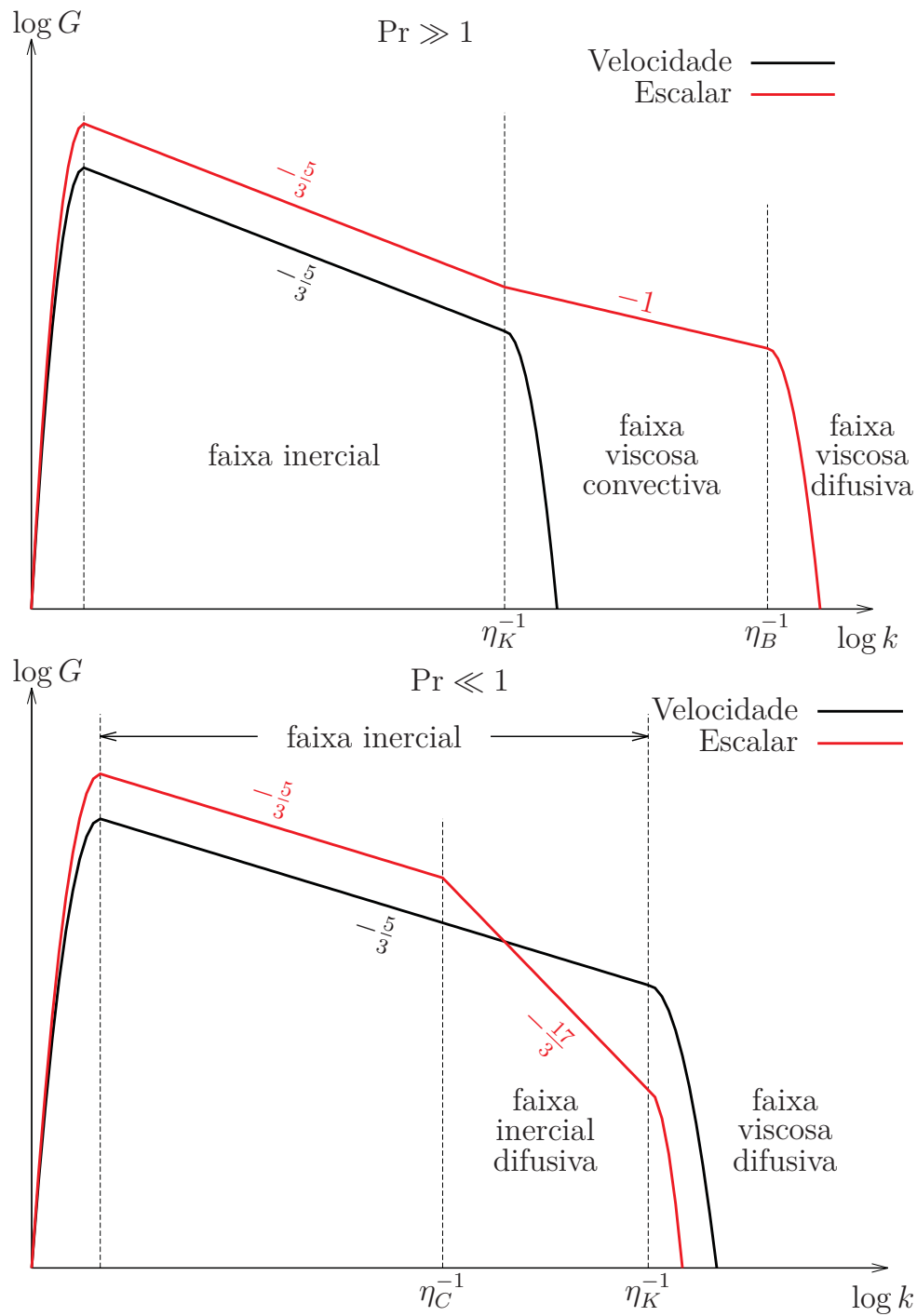


Figura 3.4: Espectros hipotéticos com inclinações previstas teoricamente para turbulência tridimensional segundo Batchelor (1959) e Batchelor et al. (1959).

Capítulo 4

Métodos numéricos

4.1 Considerações iniciais

Na seção 3.2, foram obtidas equações para as flutuações de Boussinesq adimensionais das variáveis que descrevem RBC. **Para simplificar a notação, apenas neste capítulo tais variáveis foram escritas em letras minúsculas, e tiveram seus asteriscos e linhas omitidos. Entretanto, seus significados (flutuações de Boussinesq adimensionais) são preservados. Em outras partes do texto, letras minúsculas sem asterisco indicam flutuações de Reynolds dimensionais.**

Escrito nesta forma, o sistema composto pelas seis equações diferenciais parciais (3.31), (3.32), (3.39)–(3.41) e seis incógnitas a ser resolvido numericamente é

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = w + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + w \frac{\partial q}{\partial z} = w + \text{Le} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \text{Le} \frac{\partial^2 q}{\partial z^2}, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + w \frac{\partial \omega}{\partial z} = -\text{RaPr} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \text{Pr} \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \text{Pr} \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2}, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\omega, \quad (4.4)$$

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad (4.5)$$

$$w = \frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (4.6)$$

Todas as variáveis possuem condições de contorno periódicas com período Γ em x e se anulam em $z = 0$ e $z = 1$, exceto u , que possui derivada em relação a z nula em $z = 0$ e $z = 1$.

O problema composto pelas equações (4.1)–(4.6) e suas condições inicial e de contorno é resolvido através de um esquema de diferenças finitas de quarta ordem e explícito no tempo, de forma muito semelhante ao que foi feito por Liu et al. (2003). Em resumo, o método numérico consiste em:

1. Aproximar as derivadas espaciais por esquemas de cinco pontos para garantir acurácia de quarta ordem. Próximo às placas, é necessário atribuir valores a pontos-fantasma através de extrapolações unilaterais e informações obtidas das equações de conservação.
2. Aplicar um método baseado em transformada rápida de Fourier (FFT, do inglês *fast Fourier transform*) para resolver a equação de Poisson (4.4).

3. Utilizar o método de Runge-Kutta de quarta ordem para progredir no tempo.

Além da inclusão de um escalar passivo, há duas diferenças principais entre o que foi feito neste estudo e o que foi feito por [Liu et al. \(2003\)](#). Primeiramente, neste estudo aplicamos a condição de tensão cisalhante nula sobre as placas, enquanto [Liu et al. \(2003\)](#) aplicam condições de não-deslizamento para u , o que leva à necessidade de se obter uma fórmula numérica para a vorticidade sobre as placas, pois a mesma não se anula. Além disso, a presença de camadas-limite cinemáticas sobre as placas torna as regiões próximas aos contornos bastante singulares, exigindo que a equação da vorticidade seja resolvida através de um esquema compacto para evitar problemas de estabilidade numérica. Por outro lado, quando se aplica condições de tensão cisalhante nula sobre as placas, a vorticidade se anula nestas posições. Os gradientes de velocidade suaves neste caso tornam possível a aplicação de esquemas do tipo *long-stencil*, mais rápidos computacionalmente, sem risco de problemas de estabilidade. Tais esquemas são aqueles que, com o objetivo de aumentar a acurácia do método numérico, estimam a derivada de uma função em um ponto de grade utilizando outros pontos além daqueles imediatamente vizinhos ao mesmo. Em segundo lugar, enquanto [Liu et al. \(2003\)](#) aplicam condições de contorno de Dirichlet ou de Neumann na direção horizontal, neste estudo aplicamos condições de contorno periódicas nessa direção.

O domínio foi dividido em uma grade quadrada de lado $\Delta x = \Delta z = h$, de forma que o escoamento é resolvido para as posições $x = ih$, $i = 0, \dots, N_x - 1$, em que $N_x = \Gamma/h$, e $z = kh$, $k = 0, \dots, N_z$, em que $N_z = 1/h$. O esquema de cinco pontos exige que as posições adicionais $k = -1$ e $k = N_z + 1$, correspondentes aos pontos-fantasma, e $i = -2$, $i = -1$, $i = N_x$ e $i = N_x + 1$, obtidas através das condições de contorno periódicas, também sejam resolvidas. Simulações de duração igual a L_t são resolvidas para os instantes de tempo $t = n\Delta t$, $n = 0, \dots, N_t = L_t/\Delta t$.

4.2 Discretização das derivadas espaciais

4.2.1 Equação da temperatura

Se f é qualquer variável que descreve o escoamento e $f_{i,k}^n = f(x = ih, z = kh, t = n\Delta t)$, suas derivadas primeira e segunda em relação a x podem ser aproximadas por um esquema de diferenças finitas de quarta ordem através das fórmulas de cinco pontos:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,k}^n = \frac{f_{i-2,k}^n - 8f_{i-1,k}^n + 8f_{i+1,k}^n - f_{i+2,k}^n}{12h} + \mathcal{O}(h^4), \quad (4.7)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,k}^n = \frac{-f_{i-2,k}^n + 16f_{i-1,k}^n - 30f_{i,k}^n + 16f_{i+1,k}^n - f_{i+2,k}^n}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4), \quad (4.8)$$

como pode ser verificado através da manipulação de expansões em série de Taylor de f . Suas derivadas em relação a z , por sua vez, são obtidas de forma análoga, variando-se k ao invés de i nas equações acima.

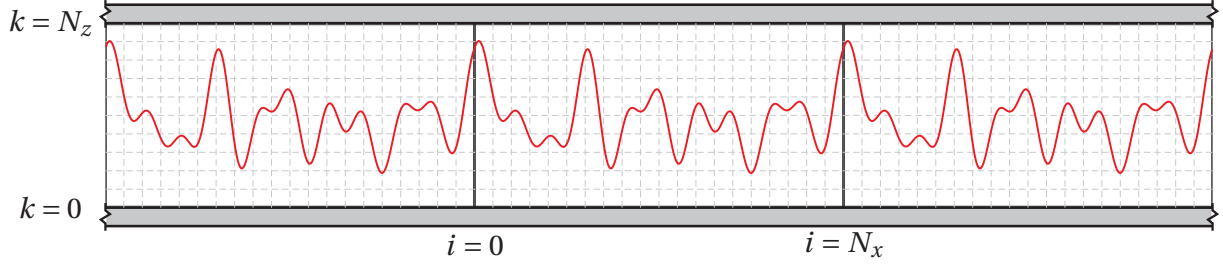


Figura 4.1: Função arbitrária atendendo a condições de contorno periódicas. O domínio computacional, subconjunto do domínio físico infinito em x , pode ser visto como a superfície de um cilindro em que as posições $i = 0$ e $i = N_x$ são equivalentes.

Com essa aproximação, a equação da conservação da energia (4.1) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{i,k}^n &= \left(-\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{1}{12h^2} \right) \theta_{i-2,k}^n + \left(-\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{1}{12h^2} \right) \theta_{i,k-2}^n + \left(\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16}{12h^2} \right) \theta_{i-1,k}^n \\ &+ \left(\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16}{12h^2} \right) \theta_{i,k-1}^n - \frac{60}{12h^2} \theta_{i,k}^n + \left(-\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16}{12h^2} \right) \theta_{i+1,k}^n \\ &+ \left(-\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16}{12h^2} \right) \theta_{i,k+1}^n + \left(\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{1}{12h^2} \right) \theta_{i+2,k}^n + \left(\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{1}{12h^2} \right) \theta_{i,k+2}^n \\ &+ w_{i,k}^n + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \quad (4.9)$$

A discretização da derivada temporal permite que (4.9) seja utilizada para se obter $\theta_{i,k}^n$ em $i = 0, \dots, N_x - 1$ e $k = 1, \dots, N_z - 1$, ou seja, os pontos internos. Das condições de contorno periódicas em x , tem-se que

$$\theta_{i+N_x,k}^n = \theta_{i,k}^n,$$

como pode ser visto na figura 4.1. As condições de contorno homogêneas de Dirichlet sobre as placas implicam em

$$\theta_{i,0}^n = \theta_{i,N_z}^n = 0.$$

Além disso, para que (4.9) seja aplicada em $k = 1$ e $k = N_z - 1$, é necessário estimar os valores de temperatura nos pontos-fantasma tais que $k = -1$ e $k = N_z + 1$. Para o primeiro caso, Liu et al. (2003) somam as expansões de $\theta_{i,-1}^n$ e $\theta_{i,1}^n$ em séries de Taylor em torno de $k = 0$ para obter

$$\theta_{i,-1}^n + \theta_{i,1}^n = 2\theta_{i,0}^n + h^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \Big|_{i,0}^n + \mathcal{O}(h^4),$$

em que $\theta_{i,0}^n = 0$. A derivada segunda de θ em relação a z em $k = 0$ pode ser obtida avaliando-se a equação da conservação da energia (4.1) em $k = 0$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{i,0}^n + u_{i,0}^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{i,0}^n + w_{i,0}^n \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{i,0}^n = w_{i,0}^n + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \Big|_{i,0}^n + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \Big|_{i,0}^n.$$

Graças às condições de contorno homogêneas de Dirichlet para w e θ , todos os termos da equação acima devem se anular. Portanto,

$$\theta_{i,-1}^n = -\theta_{i,1}^n + \mathcal{O}(h^4). \quad (4.10)$$

Analogamente, para os pontos-fantasma acima da placa superior,

$$\theta_{i,N_z+1}^n = -\theta_{i,N_z-1}^n + \mathcal{O}(h^4). \quad (4.11)$$

4.2.2 Equação do escalar passivo

A aproximação das derivadas espaciais da equação para o escalar passivo por diferenças finitas é bastante similar àquela da temperatura. Discretizada, (4.2) fica

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial q}{\partial t} \right|_{i,k}^n &= \left(-\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i-2,k}^n + \left(-\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i,k-2}^n + \left(\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i-1,k}^n \\ &+ \left(\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i,k-1}^n - \frac{60\text{Le}}{12h^2} q_{i,k}^n + \left(-\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i+1,k}^n \\ &+ \left(-\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i,k+1}^n + \left(\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i+2,k}^n + \left(\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Le}}{12h^2} \right) q_{i,k+2}^n \\ &+ w_{i,k}^n + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Das condições de contorno periódicas em x , tem-se que

$$q_{i+N_x,k}^n = q_{i,k}^n,$$

enquanto as condições de contorno homogêneas de Dirichlet implicam em

$$q_{i,0}^n = q_{i,N_z}^n = 0.$$

Nos pontos-fantasma, combinando expansões em séries de Taylor e avaliando (4.2) sobre as placas de forma similar ao que foi feito para a temperatura, encontra-se

$$\begin{aligned} q_{i,-1}^n &= -q_{i,1}^n + \mathcal{O}(h^4), \\ q_{i,N_z+1}^n &= -q_{i,N_z-1}^n + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned}$$

4.2.3 Equação da vorticidade

A discretização das derivadas espaciais da equação da conservação da quantidade de movimento angular leva a

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \omega}{\partial t} \right|_{i,k}^n &= \left(-\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i-2,k}^n + \left(-\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i,k-2}^n + \left(\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i-1,k}^n \\ &+ \left(\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i,k-1}^n - \frac{60\text{Pr}}{12h^2} \omega_{i,k}^n + \left(-\frac{8u_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i+1,k}^n \\ &+ \left(-\frac{8w_{i,k}^n}{12h} + \frac{16\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i,k+1}^n + \left(\frac{u_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i+2,k}^n + \left(\frac{w_{i,k}^n}{12h} - \frac{\text{Pr}}{12h^2} \right) \omega_{i,k+2}^n \\ &- \text{RaPr} \frac{\theta_{i-2,k}^n - 8\theta_{i-1,k}^n + 8\theta_{i+1,k}^n - \theta_{i+2,k}^n}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Das condições de contorno periódicas em x , tem-se que

$$\omega_{i+N_x,k}^n = \omega_{i,k}^n,$$

enquanto as condições de contorno homogêneas de Dirichlet implicam em

$$\omega_{i,0}^n = \omega_{i,N_z}^n = 0.$$

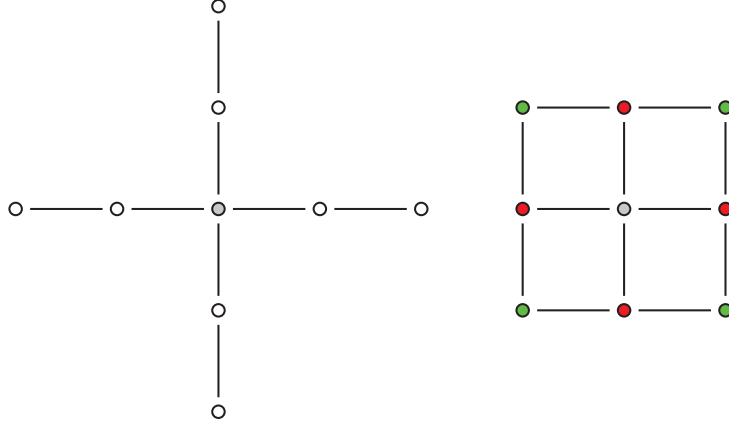


Figura 4.2: Para estimar o laplaciano de uma função nos pontos em cinza com acurácia de quarta ordem, uma aproximação do tipo *long-stencil* utiliza o esquema à esquerda, enquanto um esquema compacto, representado à direita, combina as estimativas obtidas utilizando os pontos vermelhos e verdes separadamente.

Nos pontos-fantasma, combinando expansões em séries de Taylor e avaliando (4.3) sobre as placas de forma similar ao que foi feito para os escalares, encontra-se

$$\begin{aligned}\omega_{i,-1}^n &= -\omega_{i,1}^n + \mathcal{O}(h^4), \\ \omega_{i,N_z+1}^n &= -\omega_{i,N_z-1}^n + \mathcal{O}(h^4).\end{aligned}$$

Liu et al. (2003) usam uma condição de contorno homogênea de Dirichlet para u sobre as placas (condição de não-deslizamento), o que faz com que ω não se anule sobre as placas, e equações como a fórmula de Briley (1971) ou outras descritas em Weinan e Liu (1996b) devam ser utilizadas para a vorticidade no contorno. Não é possível, nessa situação, utilizar a equação (4.3) avaliada sobre as placas para obter estimativas de ω em pontos-fantasma, o que deve ser feito alternativamente interpolando-se as séries de Taylor de ω para vários pontos no interior do domínio. Além disso, quando $u = 0$ sobre as placas, a vorticidade apresenta fortes gradientes próximo às fronteiras, o que reduz a acurácia da extrapolação de ω para pontos-fantasma.

Por esses motivos, Liu et al. (2003) utilizam um esquema compacto, o qual é capaz de aproximar numericamente derivadas em um ponto com acurácia de quarta ordem utilizando apenas informações dos pontos imediatamente vizinhos. Inspirando-se em métodos espectrais, esquemas compactos fazem com que derivadas em diferentes pontos do domínio sejam interdependentes (Lele, 1992). Por exemplo, para obter-se um esquema compacto de quarta ordem para a derivada primeira f'_i de uma função $f(x)$ em um ponto $x = ih$, escreve-se

$$c_1 f'_{i-1} + f'_i + c_1 f'_{i+1} = c_2 \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}.$$

Expandindo o lado esquerdo em séries de Taylor, determina-se $c_1 = 1/4$ e $c_2 = 3/2$. O esquema compacto utilizado por Liu et al. (2003) para estimar o laplaciano de ω é representado graficamente na figura 4.2. Neste caso, deve-se escrever

$$\begin{aligned}& \nabla^2 \omega_{i,k} + c_1 (\nabla^2 \omega_{i+1,k} + \nabla^2 \omega_{i,k+1} + \nabla^2 \omega_{i-1,k} + \nabla^2 \omega_{i,k-1}) + \\ & c_2 (\nabla^2 \omega_{i+1,k+1} + \nabla^2 \omega_{i-1,k-1} + \nabla^2 \omega_{i-1,k+1} + \nabla^2 \omega_{i+1,k-1}) = \\ & c_3 \frac{\omega_{i+1,j} + \omega_{i,j+1} - 4\omega_{i,j} + \omega_{i-1,j} + \omega_{i,j-1}}{h^2} + \\ & c_4 \frac{\omega_{i+1,j+1} + \omega_{i-1,j-1} - 4\omega_{i,j} + \omega_{i-1,j+1} + \omega_{i+1,j-1}}{2h^2}.\end{aligned}$$

Enquanto c_1 e c_3 ponderam a estimativa do laplaciano usando os pontos em vermelho na figura 4.2, c_2 e c_4 ponderam a mesma estimativa usando os pontos em verde. Expandindo o lado esquerdo da equação acima em séries de Taylor, determina-se $c_1 = 1/8$, $c_2 = 0$, $c_3 = 1$ e $c_4 = 1/2$.

Embora esquemas compactos possuam a vantagem adicional de serem mais estáveis que esquemas de cinco pontos, seu custo computacional é mais elevado. Percebe-se dos esquemas apresentados acima que as derivadas f' ou os laplacianos $\nabla^2 \omega$ em todos os pontos do domínio devem ser determinados simultaneamente. No caso de (4.3), por exemplo, torna-se necessário definir uma variável adicional e resolver outra equação de Poisson além de (4.4).

Entretanto, no presente estudo arbitrou-se usar $\partial u / \partial z = 0$ sobre as placas assim como Lorenz (1963), o que faz com que a vorticidade se anule nas fronteiras e, conseqüentemente, seja possível avaliar ω em pontos-fantasma, já que a vorticidade não possui gradientes acentuados próximo das placas causados pelo desenvolvimento de camadas-limite. Assim, aproximações de cinco pontos não causam problemas de estabilidade numérica e são preferidas pelo seu custo computacional reduzido. De forma geral, a estabilidade de aproximações de cinco pontos em conjunto com a extrapolação unilateral para pontos-fantasma é demonstrada em Wang et al. (2004).

4.2.4 Campo de velocidades

Após obter a função corrente da equação de Poisson (4.4) através do método descrito na seção 4.3, o campo de velocidades é obtido das seguintes aproximações de quarta ordem:

$$u_{i,k}^n = -\frac{\psi_{i,k-2}^n - 8\psi_{i,k-1}^n + 8\psi_{i,k+1}^n - \psi_{i,k+2}^n}{12h} + \mathcal{O}(h^4), \quad (4.14)$$

$$w_{i,k}^n = \frac{\psi_{i-2,k}^n - 8\psi_{i-1,k}^n + 8\psi_{i+1,k}^n - \psi_{i+2,k}^n}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \quad (4.15)$$

Para obter $u_{i,k}^n$ em $k = 1$ e $k = N_z - 1$, é necessário estimar $\psi_{i,k}^n$ nos pontos-fantasma. Combinando expansões em séries de Taylor, tem-se

$$\psi_{i,-1}^n + \psi_{i,1}^n = 2\psi_{i,0}^n + h^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \Big|_{i,0}^n + \mathcal{O}(h^4).$$

Aplicando as condições de contorno para a função corrente e para u , encontra-se

$$\psi_{i,-1}^n = -\psi_{i,1}^n + \mathcal{O}(h^4).$$

Analogamente, para os pontos-fantasma sobre a placa superior,

$$\psi_{i,N_z+1}^n = -\psi_{i,N_z-1}^n + \mathcal{O}(h^4).$$

Para aproximar a condição de contorno homogênea de Neumann para u por um esquema de quarta ordem, escreve-se as expansões em série de Taylor centradas em $k = 0$ para $u_{i,1}^n$, $u_{i,2}^n$ e $u_{i,3}^n$, usando o fato que $\partial u / \partial z = 0$ em $k = 0$. Em seguida, procura-se a combinação linear de tais expansões que anula as derivadas segundas e terceiras. Em outras palavras, procura-se c_1 e c_2 tal que

$$u_{i,1}^n + c_1 u_{i,2}^n + c_2 u_{i,3}^n = (1 + c_1 + c_2) u_{i,0}^n + \mathcal{O}(h^4).$$

O resultado é

$$u_{i,0}^n = \frac{18}{11} u_{i,1}^n - \frac{9}{11} u_{i,2}^n + \frac{2}{11} u_{i,3}^n + \mathcal{O}(h^4), \quad (4.16)$$

$$u_{i,N_z}^n = \frac{18}{11} u_{i,N_z-1}^n - \frac{9}{11} u_{i,N_z-2}^n + \frac{2}{11} u_{i,N_z-3}^n + \mathcal{O}(h^4). \quad (4.17)$$

Para obter $w_{i,k}^n$ em todos os pontos do domínio, observa-se que, das condições de contorno periódicas,

$$\psi_{i+N_x,k}^n = \psi_{i,k}^n,$$

e da condição de impermeabilidade das placas,

$$w_{i,0}^n = w_{i,N_z}^n = 0.$$

4.3 Solução da equação de Poisson

A aproximação por diferenças finitas em segunda ordem da equação de Poisson (4.4) é

$$\psi_{i-1,k} - 2\psi_{i,k} + \psi_{i+1,k} + \psi_{i,k-1} - 2\psi_{i,k} + \psi_{i,k+1} = -h^2\omega_{i,k}. \quad (4.18)$$

A equação (4.18) representa um sistema de equações que devem ser resolvidas simultaneamente para $\psi_{i,k}$, $i = 0, \dots, N_x - 1$ e $k = 1, \dots, N_z - 1$ a cada passo de tempo da simulação numérica, com as condições de contorno

$$\psi_{i,0}^n = \psi_{i,N_z}^n = 0, \quad \psi_{i+N_x,k}^n = \psi_{i,k}^n.$$

A literatura sobre os métodos de solução da equação de Poisson é vasta, pois equações deste tipo são frequentes na Física Matemática. Em Mecânica dos Fluidos, mesmo se não é utilizada a formulação vorticidade-função corrente, uma equação de Poisson acoplando os campos de pressão e velocidade (um efeito não-local) deve ser resolvida. Grötzbach (1983) e Wu e Moin (2008), por exemplo, o fazem utilizando FFT.

4.3.1 Métodos iterativos

Kundu et al. (2016, p. 249) sugerem reescrever (4.18) como

$$\psi_{i,k} = \frac{1}{4} (\psi_{i+1,k} + \psi_{i-1,k} + \psi_{i,k+1} + \psi_{i,k-1} + h^2\omega_{i,k}),$$

fazer uma estimativa inicial para o lado direito e aplicar algum método iterativo, tal como o método de Jacobi, Gauss-Seidel ou sobre-relaxação sucessiva.

Entretanto, há métodos mais avançados disponíveis. Versteeg e Malalasekera (2007, p. 215) sugerem reescrever (4.18) como

$$\psi_{i-1,k} - 4\psi_{i,k} + \psi_{i+1,k} = -h^2\omega_{i,k} - \psi_{i,k-1} - \psi_{i,k+1}$$

e resolver um sistema tridiagonal linha a linha, ou seja, para cada valor de k entre 1 e $N_z - 1$. Note que deve ser arbitrado um valor inicial para $\psi_{i,k+1}$, de forma que é necessário efetuar iterações até a solução convergir. As condições de contorno periódicas em x fazem com que cada sistema seja cíclico. Para resolvê-los, Strikwerda (2004, p. 91) indica que a fórmula de Sherman-Morrison pode ser utilizada para reescrever o problema em termos de um sistema puramente tridiagonal, o qual pode ser resolvido diretamente através do algoritmo de Thomas.

Para eliminar um possível viés, a equação de Poisson também pode ser resolvida coluna a coluna, ou seja, separadamente para cada valor de i . Entretanto, esta abordagem possui a desvantagem de exigir que sejam arbitrados valores iniciais para $\psi_{i-1,k}$ e para $\psi_{i+1,k}$.

Aplicando um método análogo ao proposto por Versteeg e Malalasekera (2007, p. 215) à aproximação de quarta ordem da equação (4.18), torna-se necessário resolver um sistema

pentadiagonal cíclico para cada linha k , o que pode ser feito, por exemplo, através do método proposto em Navon (1987). Além disso, deve-se utilizar pontos-fantasma e arbitrar valores iniciais para $\psi_{i,k+1}$ e para $\psi_{i,k+2}$. A solução coluna a coluna exige que arbitre-se valores iniciais para $\psi_{i-2,k}$, $\psi_{i-1,k}$, $\psi_{i+1,k}$ e $\psi_{i+2,k}$.

A grande desvantagem dos métodos iterativos aplicados a (4.4) é o elevado custo computacional envolvido, além do tempo necessário para que a solução convirja com um grau de precisão adequado.

4.3.2 Solução direta usando FFT

O método de solução da equação de Poisson utilizado neste estudo é o mesmo empregado por Liu et al. (2003), e é explicado em detalhes em Van Loan (1992, cap. 4). Apesar de consumir a maior parte do tempo de computação na simulação numérica de RBC (mesmo sendo executado paralelamente em diferentes processadores), tal método ainda é mais eficiente que as soluções iterativas.

O método consiste em reescrever o sistema de equações obtido da equação de Poisson discretizada com acurácia de segunda ordem (4.18) na base formada pelos seus autovetores, na qual o sistema pode ser resolvido com relativa facilidade. Embora não seja computacionalmente vantajoso, em geral, realizar uma mudança de base, neste caso, tal mudança corresponde numericamente a aplicar transformadas discretas de Fourier (DFT, do inglês *discrete Fourier transform*) e de seno (DST, do inglês *discrete sine transform*). Estas operações, discutidas em detalhes em Press et al. (2007, cap. 12), podem ser realizadas através de algoritmos rápidos, tais como o bem conhecido algoritmo de Cooley e Tukey (1965).

Enquanto o restante das equações foi resolvido com acurácia de quarta ordem no tempo e no espaço, a equação de Poisson foi resolvida com um esquema de segunda ordem por alguns motivos. Primeiramente, trata-se de uma equação linear, que portanto não apresenta extrema sensibilidade à acurácia do método. Além disso, sua solução não possui os erros associados ao passo de tempo (por ser uma equação diagnóstica) e à convergência de iterações (por ser resolvida diretamente). Por último, a implementação numérica do esquema de segunda ordem é mais simples e bem descrito na literatura do que um esquema de quarta ordem.

Diferentes autores definem a DFT e a DST de maneiras diferentes. Neste texto, adotou-se as definições de Van Loan (1992, p. 2–3 e 229), diferentes daquelas de Press et al. (2007, p. 607 e 621). Define-se a k -ésima componente da DFT de um vetor qualquer \mathbf{v} de tamanho n como

$$[\text{DFT}(\mathbf{v})]_k = \sum_{j=0}^{n-1} \exp\left(-\frac{2\pi i j k}{n}\right) v_j, \quad 0 \leq k \leq n-1, \quad (4.19)$$

em que $i = \sqrt{-1}$. Já a k -ésima componente da DST de um vetor qualquer \mathbf{v} de tamanho $m-1$ é

$$[\text{DST}(\mathbf{v})]_k \equiv \sum_{j=1}^{m-1} \sin\left(\frac{j k \pi}{m}\right) v_j, \quad 1 \leq k \leq m-1. \quad (4.20)$$

Note que, definindo F_n como a matriz quadrada cujos elementos são

$$f_{jk} \equiv \exp\left(-\frac{2\pi i j k}{n}\right), \quad 0 \leq j, k \leq n-1, \quad (4.21)$$

e S_{m-1} como a matriz quadrada cujos elementos são

$$s_{jk} \equiv \sin\left(\frac{j k \pi}{m}\right), \quad 1 \leq j, k \leq m-1, \quad (4.22)$$

pode-se escrever $[\text{DST}(v)]_k = s_{jk}v_j$ e $[\text{DFT}(v)]_k = f_{jk}v_j$. Em outras palavras, multiplicar um vetor por F_n ou S_{m-1} corresponde a calcular sua DFT ou DST. As correspondentes transformadas inversas podem ser calculadas multiplicando-se um vetor por $F_n^{-1} = F_n^*/n$ ou por $S_{m-1}^{-1} = 2S_{m-1}/m$.

O método de solução da equação de Poisson consiste em definir as matrizes função corrente e vorticidade como

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_{0,1} & \cdots & \psi_{0,N_z-1} \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{N_x-1,1} & \cdots & \psi_{N_x-1,N_z-1} \end{bmatrix}, \quad \Omega = \begin{bmatrix} \omega_{0,1} & \cdots & \omega_{0,N_z-1} \\ \vdots & & \vdots \\ \omega_{N_x-1,1} & \cdots & \omega_{N_x-1,N_z-1} \end{bmatrix},$$

e em seguida aplicar três passos:

1. Defina a matriz auxiliar

$$G \equiv F_{N_x} \Omega S_{N_z-1}^{-1}. \quad (4.23)$$

Isso é feito tomando-se a DFT de cada coluna da matriz vorticidade, e em seguida calculando a DST inversa de cada linha da matriz resultante. Esta etapa equivale a reescrever a matriz forçante Ω em outra base.

2. Reescale cada elemento g_{jk} de G através de

$$\tilde{g}_{jk} \equiv \frac{h^2}{4 \left[\sin^2 \left(\frac{j\pi}{N_x} \right) + \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2N_z} \right) \right]} g_{jk} \quad (4.24)$$

para obter a matriz \tilde{G} , o que corresponde à divisão dos elementos de G pela soma de autovalores.

3. Retorne à base original para obter

$$\Psi = F_{N_x}^{-1} \tilde{G} S_{N_z-1}. \quad (4.25)$$

Isto é feito tomando-se a DFT inversa das colunas de \tilde{G} , e em seguida calculando a DST das linhas da matriz resultante.

Em resumo, é necessário efetuar duas DFTs em $N_z - 1$ vetores de tamanho N_x , e duas DST em N_x vetores de tamanho $N_z - 1$ cada vez que uma equação de Poisson deve ser resolvida. Ainda que este método direto usando FFT seja mais eficiente que outros métodos, todo este procedimento possui um custo computacional significativo. Neste estudo, foi utilizado o pacote FFTPACK5.1D para Fortran, descrito em [Swarztrauber \(1984\)](#). Além disso, o código foi paralelizado para máquinas de memória compartilhada utilizando as diretrizes OpenMP discutidas por [Hermanns \(2002\)](#). Uma das regiões paralelas que tornaram o código mais eficiente é aquela correspondente ao cálculo de DFT e DST de linhas e colunas de matrizes, tarefas que podem ser realizadas independentemente.

Finalmente, é importante destacar que o método não possui nenhum erro associado ao *aliasing*, dado que o número de pontos utilizados para a solução numérica da equação de Poisson é suficiente para resolver todas as escalas do problema, e a linearidade de tal equação impede que as operações produzam escalas menores não resolvidas. Além disso, destaca-se que a equação de Poisson pode ser resolvida através de DFTs e DSTs graças ao fato de que as funções que compõem as bases de tais transformadas são as autofunções do laplaciano em um sistema de coordenadas cartesiano, que portanto diagonalizam o problema.

O método (4.23)–(4.25) é muito semelhante ao encontrado por [Barkas \(2005\)](#) para condições de contorno homogêneas de Dirichlet nas duas direções. É importante apenas destacar que este autor se equivoca em um ponto. A multiplicação de uma matriz por S_{m-1} à direita equivale a tomar a DST de suas linhas, enquanto a multiplicação à esquerda transforma suas colunas; o autor escreve o oposto. [Van Loan \(1992, p. 256\)](#) também comete um equívoco, indicando que deve-se multiplicar os senos em (4.24) ao invés de somá-los, o que conduziria a uma divisão por zero quando $j = 0$. A seção 4.3.3 contém a prova de que deve-se somar, e não multiplicar os senos em (4.24).

4.3.3 Demonstração do método

Primeiramente, define-se a matriz quadrada tridiagonal de ordem n e a matriz cíclica associada respectivamente como:

$$T_n = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad T_n^{(P)} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Em seguida, define-se a operação de vetorização de uma matriz como a união sequencial das suas colunas, na forma

$$\text{vet}(\Psi) = [\psi_{0,1} \quad \dots \quad \psi_{N_x-1,1} \quad \dots \quad \psi_{0,N_z-1} \quad \dots \quad \psi_{N_x-1,N_z-1}]^T.$$

Esta operação transforma uma matriz $n \times m$ em um vetor com nm elementos. Em termos dos vetores $\text{vet}(\Psi)$ e $\text{vet}(\Omega)$, (4.18) pode ser reescrita matricialmente como

$$\left[\left(I_{N_z-1} \otimes T_{N_x}^{(P)} \right) + \left(T_{N_z-1} \otimes I_{N_x} \right) \right] \text{vet}(\Psi) = -h^2 \text{vet}(\Omega), \quad (4.26)$$

em que \otimes denota o produto de Kronecker, e I_n é a matriz identidade de tamanho n . O produto de Kronecker entre duas matrizes A e B , discutido em detalhes em [Horn e Johnson \(1991, cap. 4\)](#), resulta em uma matriz definida por blocos, em que cada bloco corresponde à matriz B multiplicada por um elemento de A .

De maneira mais geral, considere o sistema

$$[(I_m \otimes A) + (B \otimes I_n)] \text{vet}(X) = \text{vet}(Y).$$

Sejam V_A e V_B as matrizes cujas colunas são os autovetores de A e B , respectivamente, e sejam D_A e D_B as matrizes diagonais cujos elementos são respectivamente os autovalores λ_j^A de A e λ_k^B de B . [Van Loan \(1992, p. 256\)](#) mostrou que

$$\text{vet}(X) = (V_B \otimes V_A) [(I_m \otimes D_A) + (D_B \otimes I_n)]^{-1} (V_B^{-1} \otimes V_A^{-1}) \text{vet}(Y).$$

Por razões práticas, vamos reescrever a equação acima eliminando as operações de vetorização e os produtos de Kronecker. O último produto na equação acima pode ser reescrito usando o lema dado em [Horn e Johnson \(1991, p. 254\)](#):

$$(V_B^{-1} \otimes V_A^{-1}) \text{vet}(Y) = \text{vet} \left[V_A^{-1} Y (V_B^{-1})^T \right] = \text{vet} (V_A^{-1} Y V_B^{-1}),$$

em que a última igualdade vale se V_B^{-1} é uma matriz simétrica. Definindo $G \equiv V_A^{-1} Y V_B^{-1}$,

$$\text{vet}(X) = (V_B \otimes V_A) [(I_m \otimes D_A) + (D_B \otimes I_n)]^{-1} \text{vet}(G).$$

O primeiro produto de Kronecker dentro dos colchetes resulta em uma matriz diagonal de tamanho mn cujos elementos são

$$\underbrace{(\lambda_1^A \ \lambda_2^A \ \dots \ \lambda_n^A) \ (\lambda_1^A \ \lambda_2^A \ \dots \ \lambda_n^A) \ \dots \ (\lambda_1^A \ \lambda_2^A \ \dots \ \lambda_n^A)}_{m \text{ vezes}}.$$

O segundo produto de Kronecker dentro dos colchetes também resulta em uma matriz diagonal de tamanho mn , cujos elementos são

$$\underbrace{\lambda_1^B \ \lambda_1^B \ \dots \ \lambda_1^B}_{n \text{ vezes}} \underbrace{\lambda_2^B \ \lambda_2^B \ \dots \ \lambda_2^B}_{n \text{ vezes}} \dots \underbrace{\lambda_m^B \ \lambda_m^B \ \dots \ \lambda_m^B}_{n \text{ vezes}}.$$

A soma destas duas matrizes também é uma matriz diagonal contendo somas de dois autovalores em cada posição, e sua inversa é obtida substituindo-se cada um de seus elementos não-nulos pelos seus recíprocos. Assim, podemos definir

$$\text{vet}(\tilde{G}) \equiv [(I_m \otimes D_A) + (D_B \otimes I_n)]^{-1} \text{vet}(G),$$

em que os elementos de \tilde{G} são dados por

$$\tilde{g}_{jk} = \frac{g_{jk}}{\lambda_j^A + \lambda_k^B}.$$

O denominador da fração acima é a soma dos autovalores, e não o produto como indicado erroneamente em [Van Loan \(1992, p. 256\)](#). Finalmente, usando o mesmo lema utilizado anteriormente dado em [Horn e Johnson \(1991, p. 254\)](#),

$$\text{vet}(X) = (V_B \otimes V_A) \text{vet}(\tilde{G}) = \text{vet}(V_A \tilde{G} V_B^T) = \text{vet}(V_A \tilde{G} V_B),$$

em que a última igualdade vale se V_B for uma matriz simétrica.

Este resultado geral é compatível com o resultado que [Barkas \(2005\)](#) obteve para condições de contorno homogêneas de Dirichlet, e também é compatível para as condições de contorno adotadas no presente estudo. [Van Loan \(1992, p. 250 e 253\)](#) demonstra que, coincidentemente, s_{jk} dado por (4.22) e f_{jk} dado por (4.21) são as componentes dos autovetores da matriz tridiagonal e da matriz cíclica associada, respectivamente. Além disso, os autovalores da matriz tridiagonal são dados por

$$\lambda_j = -4 \sin^2 \left(\frac{j\pi}{2N_z} \right), \quad j = 1, \dots, N_z - 1,$$

e os autovalores da matriz tridiagonal cíclica são

$$\lambda_j^{(P)} = -4 \sin^2 \left(\frac{j\pi}{N_x} \right), \quad j = 0, \dots, N_x - 1.$$

Assim, no nosso caso, temos $V_A = F_{N_x}^{-1}$ e $V_B = S_{N_z-1}$, o que completa a prova. Note que, como os elementos de S_{N_z-1} são s_{jk} , que por sua vez são funções do produto jk , ambas V_B e $V_B^{-1} = 2S_{N_z-1}/N_z$ são simétricas.

4.4 Discretização das derivadas temporais

De maneira geral, em DNS utiliza-se métodos explícitos de discretização temporal (Moin e Mahesh, 1998). Métodos explícitos costumam apresentar alguma condição de estabilidade que limita o passo de tempo a valores pequenos, o que aumenta o seu custo computacional. Métodos implícitos, por outro lado, costumam ser incondicionalmente estáveis, permitindo o emprego de um passo de tempo maior. Contudo, o passo de tempo em DNS deve ser inferior à microescala de Kolmogorov, o que reduz a vantagem da utilização de métodos implícitos. Além disso, estes métodos requerem a resolução de grandes sistemas de equações, o que nem sempre é uma tarefa trivial.

Em particular, Davidson (2004, p. 425) destaca que é comum o uso do método de Runge-Kutta de ordem 4 (RK4) em DNS, método empregado no presente estudo. Este método possui acurácia de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^4)$, e pode ser empregado até mesmo em escoamentos com elevado número de Reynolds, o que não é verdade para métodos de primeira e segunda ordem, que tornam-se incondicionalmente instáveis para Re elevado, como demonstrado por Weinan e Liu (1996b).

Discretizando as derivadas espaciais, as equações (4.1)–(4.6) tornam-se, em cada ponto do domínio, um sistema do tipo

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial \theta}{\partial t}\right|^n &= f_\theta(u^n, w^n, \theta^n), \\ \left.\frac{\partial q}{\partial t}\right|^n &= f_q(u^n, w^n, q^n), \\ \left.\frac{\partial \omega}{\partial t}\right|^n &= f_\omega(u^n, w^n, \omega^n, \theta^n), \\ \nabla^2 \psi^n &= -\omega^n, \quad u^n = -\frac{\partial \psi^n}{\partial z}, \quad w^n = \frac{\partial \psi^n}{\partial x},\end{aligned}$$

em que f_θ , f_q e f_ω são funções dos valores que as variáveis explicitadas acima assumem em diversos pontos do domínio, mas no mesmo instante de tempo.

O princípio de um método de segunda ordem é ilustrado na figura 4.3. Enquanto um método de primeira ordem utiliza apenas a derivada da curva (dada pela equação diferencial) avaliada no início do intervalo considerado, levando à estimativa $\Delta\theta_1$ para a variação de θ ao longo de Δt , o método de segunda ordem também utiliza a derivada no final do intervalo, que estima que θ varia de uma quantidade $\Delta\theta_2$ ao longo do intervalo. A variação efetivamente adotada é a média entre $\Delta\theta_1$ e $\Delta\theta_2$.

Analogamente, o método RK4 consiste na obtenção de quatro valores para o incremento a ser somado a cada variável ao longo de um intervalo de tempo. Suas estimativas no instante de tempo seguinte são calculadas como médias ponderadas destes quatro valores. As primeiras estimativas das variações de θ , q e ω são calculadas a partir de aproximações de suas derivadas no início do intervalo:

$$\begin{aligned}\tilde{\theta}_1^{n+1} - \theta^n &= \Delta\theta_1 = \Delta t f_\theta(u^n, w^n, \theta^n), \\ \tilde{q}_1^{n+1} - q^n &= \Delta q_1 = \Delta t f_q(u^n, w^n, q^n), \\ \tilde{\omega}_1^{n+1} - \omega^n &= \Delta\omega_1 = \Delta t f_\omega(u^n, w^n, \omega^n, \theta^n).\end{aligned}$$

Entretanto, não temos equações para as derivadas de ψ , u e w à disposição. Assim, a primeira estimativa do incremento destas três variáveis devem ser obtidas a partir de $\tilde{\omega}_1^{n+1}$, resolvendo

$$\nabla^2 \tilde{\psi}_j^{n+1} = -\tilde{\omega}_j^{n+1}, \quad \tilde{u}_j^{n+1} = -\frac{\partial \tilde{\psi}_j^{n+1}}{\partial z}, \quad \tilde{w}_j^{n+1} = \frac{\partial \tilde{\psi}_j^{n+1}}{\partial x}, \quad (4.27)$$

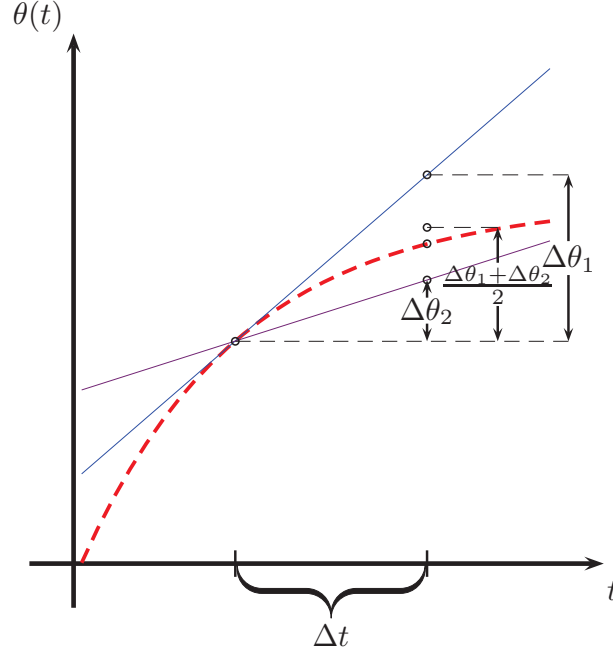


Figura 4.3: Um esquema explícito de segunda ordem usa as retas azul e violeta, de inclinações iguais à derivada da função a ser estimada (curva tracejada em vermelho) no início e no final do intervalo de largura Δt , respectivamente, para estimar $\theta(t)$ no instante de tempo seguinte.

e então fazendo

$$\Delta\psi_j = \tilde{\psi}_j^{n+1} - \psi^n, \quad \Delta u_j = \tilde{u}_j^{n+1} - u^n, \quad \Delta w_j = \tilde{w}_j^{n+1} - w^n \quad (4.28)$$

com $j = 1$. As equações (4.27) correspondem à conversão entre formas equivalentes de descrição do campo de velocidades estimado.

As segundas estimativas das variações de θ , q e ω são obtidas de aproximações de suas derivadas no centro do intervalo:

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_2^{n+1} - \theta^n &= \Delta\theta_2 = \Delta t f_\theta \left(u^n + \frac{\Delta u_1}{2}, w^n + \frac{\Delta w_1}{2}, \theta^n + \frac{\Delta\theta_1}{2} \right), \\ \tilde{q}_2^{n+1} - q^n &= \Delta q_2 = \Delta t f_q \left(u^n + \frac{\Delta u_1}{2}, w^n + \frac{\Delta w_1}{2}, q^n + \frac{\Delta q_1}{2} \right), \\ \tilde{\omega}_2^{n+1} - \omega^n &= \Delta\omega_2 = \Delta t f_\omega \left(u^n + \frac{\Delta u_1}{2}, w^n + \frac{\Delta w_1}{2}, \omega^n + \frac{\Delta\omega_1}{2}, \theta^n + \frac{\Delta\theta_1}{2} \right). \end{aligned}$$

A segunda estimativa do incremento de ψ , u e w é obtido de (4.27) e (4.28) com $j = 2$. No terceiro passo do método RK4, aproxima-se as funções f_θ , f_q e f_ω no centro do intervalo com os valores recém obtidos:

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_3^{n+1} - \theta^n &= \Delta\theta_3 = \Delta t f_\theta \left(u^n + \frac{\Delta u_2}{2}, w^n + \frac{\Delta w_2}{2}, \theta^n + \frac{\Delta\theta_2}{2} \right), \\ \tilde{q}_3^{n+1} - q^n &= \Delta q_3 = \Delta t f_q \left(u^n + \frac{\Delta u_2}{2}, w^n + \frac{\Delta w_2}{2}, q^n + \frac{\Delta q_2}{2} \right), \\ \tilde{\omega}_3^{n+1} - \omega^n &= \Delta\omega_3 = \Delta t f_\omega \left(u^n + \frac{\Delta u_2}{2}, w^n + \frac{\Delta w_2}{2}, \omega^n + \frac{\Delta\omega_2}{2}, \theta^n + \frac{\Delta\theta_2}{2} \right), \end{aligned}$$

e resolve-se (4.27) e (4.28) com $j = 3$. Por último, aproxima-se as derivadas de θ , q e ω no final do intervalo:

$$\begin{aligned}\tilde{\theta}_4^{n+1} - \theta^n &= \Delta\theta_4 = \Delta t f_\theta \left(\tilde{u}_3^{n+1}, \tilde{w}_3^{n+1}, \tilde{\theta}_3^{n+1} \right), \\ \tilde{q}_4^{n+1} - q^n &= \Delta q_4 = \Delta t f_q \left(\tilde{u}_3^{n+1}, \tilde{w}_3^{n+1}, \tilde{q}_3^{n+1} \right), \\ \tilde{\omega}_4^{n+1} - \omega^n &= \Delta\omega_4 = \Delta t f_\omega \left(\tilde{u}_3^{n+1}, \tilde{w}_3^{n+1}, \tilde{\omega}_3^{n+1}, \tilde{\theta}_3^{n+1} \right),\end{aligned}$$

e resolve-se (4.27) e (4.28) com $j = 4$. Finalmente, os valores de cada variável no instante de tempo seguinte é dado pelas médias

$$\begin{aligned}\theta^{n+1} &= \theta^n + \frac{\Delta\theta_1}{6} + \frac{\Delta\theta_2}{3} + \frac{\Delta\theta_3}{3} + \frac{\Delta\theta_4}{6}, \\ q^{n+1} &= q^n + \frac{\Delta q_1}{6} + \frac{\Delta q_2}{3} + \frac{\Delta q_3}{3} + \frac{\Delta q_4}{6}, \\ \omega^{n+1} &= \omega^n + \frac{\Delta\omega_1}{6} + \frac{\Delta\omega_2}{3} + \frac{\Delta\omega_3}{3} + \frac{\Delta\omega_4}{6}, \\ \psi^{n+1} &= \psi^n + \frac{\Delta\psi_1}{6} + \frac{\Delta\psi_2}{3} + \frac{\Delta\psi_3}{3} + \frac{\Delta\psi_4}{6}, \\ u^{n+1} &= u^n + \frac{\Delta u_1}{6} + \frac{\Delta u_2}{3} + \frac{\Delta u_3}{3} + \frac{\Delta u_4}{6}, \\ w^{n+1} &= w^n + \frac{\Delta w_1}{6} + \frac{\Delta w_2}{3} + \frac{\Delta w_3}{3} + \frac{\Delta w_4}{6}.\end{aligned}$$

Note que, a cada passo de tempo, quatro equações de Poisson devem ser resolvidas, acarretando em um grande custo computacional. Finalmente, o presente estudo também utiliza o método RK4 para resolver as equações de Lorenz.

4.5 Critérios de execução do algoritmo

Nesta seção, são apresentadas as condições de estabilidade do esquema numérico, dadas por Liu et al. (2003) e deduzidas em Weinan e Liu (1996a) e Wang e Liu (2002). O uso de um método explícito faz com que o esquema seja apenas condicionalmente estável. Posteriormente, são discutidos cada um dos critérios dados por Grötzbach (1983) para uma simulação numérica direta acurada de RBC: a representação adequada das maiores e das menores escalas, assim como das camadas-limite sobre as placas. Esta seção se encerra com a determinação de regras práticas para a execução do algoritmo numérico.

Neste estudo, as simulações numéricas buscam verificar separadamente a influência dos números de Rayleigh e de Lewis sobre o comportamento dos escalares em RBC. Por isso, o número de Prandtl e a razão de aspecto são mantidos constantes. Assim como Saltzman (1962) e Lorenz (1963), adota-se $Pr = 10$. Os fatores a serem considerados ao arbitrar-se a razão de aspecto são discutidos na seção 4.5.2.

4.5.1 Estabilidade numérica

Primeiramente, Liu et al. (2003) indicam que é necessário que o número de Courant Co seja menor que a unidade:

$$Co \equiv \frac{\mathcal{U}^* \Delta t}{h} \leq 1. \quad (4.29)$$

Esta é a conhecida condição de estabilidade de Courant–Friedrichs–Lewy (Smith, 1985, p. 186; Randall, 1992, p. 110), que exige que um elemento de fluido não se desloque uma distância superior à espessura da malha numérica durante um passo de tempo. Utilizou-se uma escala de velocidade adimensional \mathcal{U}^* no critério acima, pois a velocidade do escoamento em cada ponto de grade é desconhecido a priori. Segundo a equação (3.35), a escala de velocidade adimensional se relaciona com os outros parâmetros adimensionais segundo $\mathcal{U}^* \sim \text{RePr}$. Supondo que a velocidade do escoamento é da ordem da velocidade de queda livre, uma primeira estimativa do número de Reynolds é dada por (3.34), de onde obtém-se

$$\Delta t \leq \frac{h}{\sqrt{\text{RaPr}}}. \quad (4.30)$$

Note que, a rigor, esta é apenas uma estimativa inicial: mesmo satisfazendo (4.30), o algoritmo numérico pode se instabilizar caso o escoamento atinja velocidades superiores à velocidade de queda livre em algum ponto, de forma que o número de Reynolds ultrapasse a ordem de magnitude dada por (3.34).

A segunda condição de estabilidade dada por Liu et al. (2003) refere-se ao número de Fourier Fo :

$$\text{Fo} \equiv \frac{\mathcal{D}\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{4} \quad \Rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{h^2}{4\mathcal{D}}, \quad (4.31)$$

em que \mathcal{D} é a maior constante com papel de difusividade molecular em (4.1)–(4.3), isto é, a maior constante multiplicando o laplaciano em tais equações:

$$\mathcal{D} \equiv \max(1, \text{Le}, \text{Pr}). \quad (4.32)$$

Assim, o passo de tempo deve ser limitado de tal forma que o processo difusivo mais eficiente (e, portanto, também os outros processos) não seja capaz de alterar a solução significativamente até o instante seguinte. Diferentemente do que ocorre para a condição sobre o número de Courant, o valor de \mathcal{D} é conhecido a priori em cada simulação. Em particular, para $\text{Pr} = 10$, \mathcal{D} é simplesmente o maior valor entre Pr e Le .

Em resumo, dada a espessura da malha h , e os parâmetros adimensionais Ra , Pr e Le adotados, uma simulação numérica será estável se o passo de tempo Δt for inferior aos critérios dados por (4.30) e (4.31). É importante destacar que tais critérios referem-se à estabilidade linear do esquema numérico. A possibilidade do surgimento de instabilidades devido aos termos não-lineares não deve ser descartada.

4.5.2 Razão de aspecto

Embora a geometria de RBC adotada no presente estudo seja infinita na direção horizontal, sua implementação computacional requer que o domínio seja truncado em um comprimento L . A adimensionalização deste valor pela distância entre as placas H leva à definição da razão de aspecto $\Gamma \equiv L/H$, que no presente estudo deve ser interpretada como um comprimento de periodicidade, graças às condições de contorno periódicas adotadas na direção horizontal.

A maior parte dos estudos em RBC utiliza paredes laterais adiabáticas, de forma que os vários valores de Γ utilizados na literatura refletem de fato a geometria de uma caixa ou de um tanque. Zhou et al. (2012), por exemplo, realizaram medições experimentais em RBC em um tanque retangular com razão de aspecto variando entre 0,3 e 20,8. Interessantemente, os autores não encontraram uma relação de dependência entre o número de Nusselt e Γ , muito embora seja conhecido que Nu_θ diminui com um aumento de Γ em RBC com geometria cilíndrica.

No problema bidimensional idealizado, em que $\Gamma \rightarrow \infty$, qualquer comprimento de periodicidade associado ao escoamento, se existente, não é arbitrário, mas surge naturalmente à medida que o sistema se desenvolve a partir das suas condições iniciais. Tal comprimento deve ser, a princípio, função apenas de Ra e Pr , os únicos parâmetros adimensionais independentes em RBC nesta situação (na ausência de um segundo escalar além da temperatura). Portanto, numa tentativa de se aproximar desta situação, simulações numéricas devem adotar um valor de Γ grande o suficiente para conter tal comprimento de periodicidade “natural”. [Busse \(1978\)](#), por exemplo, sugere que Γ deve ser no mínimo igual a 30 em experimentos. Ainda assim, destaca-se que a adoção de condições de contorno periódicas deve reduzir este efeito de confinamento em comparação com o caso em que há limitações físicas nas laterais. Em outras palavras, o comportamento assintótico do escoamento quando $\Gamma \rightarrow \infty$, se existente, deve se manifestar para valores menores de Γ quando aplica-se condições de contorno periódicas ao invés de introduzir-se paredes nas laterais do escoamento.

[Grötzbach \(1983\)](#) recomenda que Γ deve ser grande o suficiente para permitir o desenvolvimento dos fenômenos com os maiores comprimentos de onda λ_{max} para dados valores de Ra e Pr pois, caso a razão de aspecto restrinja as estruturas mais energéticas, o fluxo vertical de calor e possivelmente o regime de escoamento são alterados. Por outro lado, o custo computacional da simulação direta de RBC é diretamente proporcional a Γ , o que inviabiliza a adoção de um valor muito grande. Por esta razão, este estudo não buscou um valor de Γ que simule um possível comportamento assintótico de RBC quando $\Gamma \rightarrow \infty$, o que requer $\Gamma \gg \lambda_{max}$. Arbitrou-se utilizar apenas $\Gamma > \lambda_{max}$, grande o suficiente para que as maiores estruturas sejam representadas, o que [Grötzbach \(1983\)](#) indica ser suficiente.

Entretanto, tal comprimento de onda é função dos números de Rayleigh e de Prandtl. De experimentos, sabe-se que a relação $\lambda_{max} = \lambda_{max}(Ra)$ é crescente e apresenta uma forte histerese: dado um único valor de Ra , observa-se experimentalmente diferentes comprimentos de onda fundamentais no escoamento se tal valor Ra é atingido aumentando-se ou diminuindo-se o gradiente de temperatura entre as placas, por exemplo. Na realidade, esta histerese é a razão pela qual não recomenda-se utilizar como condição inicial de uma simulação numérica o escoamento para número de Rayleigh inferior interpolado para uma grade mais fina. Condições iniciais aleatórias são preferíveis, pois partem de comprimentos de onda inicialmente muito pequenos que crescem para um valor natural de λ_{max} . Destaca-se que não há garantia de que a relação $\lambda_{max} = \lambda_{max}(Ra, Pr)$ em RBC bidimensional seja esta descrita acima, observada em experimentos.

No ar ($Pr = 0,7$), [Willis et al. \(1972\)](#) mediram $\lambda_{max} \lesssim 4,2$ para $Ra \lesssim 3 \times 10^4$; em água ($Pr = 6,7$), mediram $\lambda_{max} \lesssim 4,3$ para $Ra \lesssim 3 \times 10^4$, e em óleo de silicone ($Pr = 450$), mediram $\lambda_{max} \lesssim 3,0$ para $Ra \lesssim 3,5 \times 10^4$. A histerese se mostrou mais pronunciada para números de Prandtl elevados. Além disso, λ_{max} cresce menos rapidamente com um aumento do número de Rayleigh para Ra ou Pr elevados. Para o ar, as soluções das equações para o escoamento médio obtidas por [Daly \(1974\)](#) indicaram $\lambda_{max} \approx 6,0$ para $Ra = 6 \times 10^5$. Embora estes valores do número de Rayleigh sejam relativamente baixos quando comparados com aqueles reportados na literatura ([Ahlers et al., 2009](#)), adotar uma razão de aspecto superior aos valores correspondentes de λ_{max} causaria um custo computacional excessivo. Por isso, este estudo arbitra $\Gamma = 5$, um valor suficientemente elevado para representar todas as estruturas em RBC até um valor razoável do número de Rayleigh. Para Ra elevado, entretanto, $\Gamma = 5$ pode causar um efeito de confinamento.

Para verificar se a razão de aspecto adotada é grande o suficiente para determinado número de Rayleigh, deve-se identificar visualmente a repetição de estruturas ou estatísticas do escoamento ao longo da direção horizontal. Além disso, [Moin e Mahesh \(1998\)](#) indicam que as

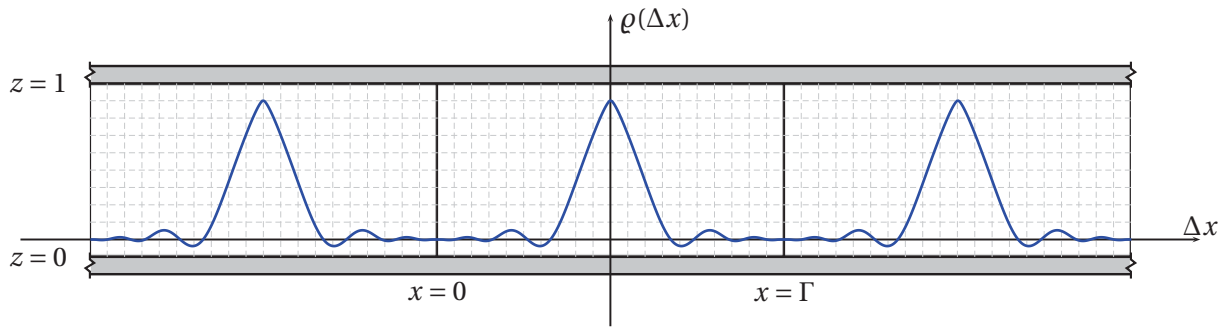


Figura 4.4: Função de autocorrelação hipotética ρ (em azul) em função da separação Δx na direção horizontal, ilustrando a periodicidade do domínio e uma razão de aspecto grande o suficiente para que ρ tenda a zero.

funções de autocorrelação $\rho(\Delta x)$ das variáveis do escoamento separadas por uma distância Δx na direção horizontal devem se aproximar de zero para separações $\Delta x \lesssim \Gamma/2$. Um exemplo hipotético é apresentado na figura 4.4, em que utilizou-se o fato de que $\rho(\Delta x)$ é uma função par (Pope, 2000, p. 68) e o domínio periódico. A periodicidade também faz com que escalas integrais estatísticas devam ser calculadas integrando-se a função de autocorrelação até uma separação $\Delta x = \Gamma/2$, ao invés de integrar-se até uma separação infinita.

Davidson (2004, p. 434) estabelece uma relação de dependência entre o comportamento assintótico da função de autocorrelação quando $\Delta x \rightarrow \infty$ e a dinâmica de larga escala em escoamentos turbulentos, alertando sobre a possível influência de condições de contorno periódicas (que fazem com que ρ seja unitária periodicamente) sobre os mesmos. Entretanto, Yeung e Pope (1989) mostraram que, para turbulência isotrópica, embora os grandes vórtices sejam afetados pelo comprimento de periodicidade arbitrado, as pequenas escalas não são alteradas.

Finalmente, note que as soluções das equações de Lorenz sempre apresentam comprimento de onda fundamental dado por $\lambda_{max} = 2a^{-1}$, em que a é o número de onda das séries de Fourier (3.51) e (3.52). Este número de onda não pode ser obtido numericamente das equações de Lorenz, mas deve ser arbitrado. Costuma-se utilizar o valor que minimiza o número de Rayleigh crítico dado por (3.47), $a = 1/\sqrt{2}$, correspondente a $\lambda_{max} = 2\sqrt{2}$.

4.5.3 Representação das microescalas

Para que as menores estruturas turbulentas sejam representadas com acurácia, deve-se utilizar como critério de resolução espacial a menor microescala entre a microescala de Kolmogorov η_u^* , dada por (3.83), e as microescalas dos escalares. Nos casos em que $Pr < 1$ ou $Sc < 1$, as microescalas dos escalares são dadas pela microescala de Obukhov-Corrsin (3.87). Entretanto, esta microescala é sempre maior que a microescala de Kolmogorov, e portanto não influencia o critério de resolução espacial (ao contrário do que afirma Grötzbach (1983), que confunde a microescala de Batchelor com a microescala de Obukhov-Corrsin).

Por outro lado, nos casos em que $Pr > 1$ ou $Sc > 1$, as microescalas dos escalares são dadas pela microescala de Batchelor (3.85), inferior à microescala de Kolmogorov. Dado que o número de Prandtl é mantido fixo igual a $Pr = 10$, a menor microescala é sempre aquela da temperatura, exceto nos casos em que $Sc > 10$, situação em que o escalar passivo possui a menor microescala de comprimento. Em termos do número de Lewis, esta situação ocorre quando $Le < 1$. Em líquidos, em geral $Sc \sim 10^3$, o que causa um custo computacional elevado, pois a difusão ocorre em escalas muito menores que a microescala de Kolmogorov. Já para gases na atmosfera, em geral $Sc \sim 1$ (Massman, 1998; Cussler, 2009, p. 251). Note que usar a micro-

escala de Batchelor como critério de resolução espacial para Pr ou Sc ligeiramente superior à unidade é conservador, dado que η_B é o valor assintótico para o qual tende a microescala de um escalar conforme Pr ou Sc tende ao infinito.

É importante destacar que ambas as microescalas de Kolmogorov e de Batchelor fornecem apenas a ordem de magnitude das menores estruturas turbulentas, e não seus comprimentos exatos. Na realidade, há diversas evidências de que a microescala de Kolmogorov subestima o comprimento de dissipação. Ao observarem os espectros de energia e dissipação obtidos de seu DNS para turbulência isotrópica, [Yeung e Pope \(1989\)](#) verificaram que toda a dissipação de energia havia ocorrido em comprimentos superiores a $2\eta_u$. Os autores sugeriram que uma grade com espessura igual ao dobro da microescala de Kolmogorov seria suficiente para calcular estatísticas de primeira e segunda ordem, tais como $\varepsilon = 2\nu \langle s_{ij}s_{ij} \rangle$. Este resultado foi confirmado por [Pope \(2000, p. 237\)](#) que, usando uma equação semi-empírica para o espectro (igual ao produto entre a equação para a faixa inercial dada pela teoria de Kolmogorov e funções envolvendo parâmetros empíricos), verificou que a maior parte da dissipação de energia ocorre em escalas superiores a $(\nu^3\varepsilon^{-1})^{1/4}$.

[Davidson \(2004, p. 406\)](#) sugere que, em turbulência isotrópica, os menores vórtices têm tamanho da ordem de $6\eta_u$, e indica que tal valor é consistente com evidências experimentais. O autor afirma que se tornou uma prática comum em DNS utilizar $h = 2\eta_u$. As várias simulações diretas de [Stevens et al. \(2010\)](#) utilizaram malhas de espessura variável entre $0,21\eta_u$ e $10,88\eta_u$. [Moser e Moin \(1987\)](#) mostraram que a maior parte da dissipação em um escoamento em canal ocorre em escalas superiores a $15\eta_u$. [Grötzbach \(1983\)](#) indica que a espessura da malha deve ser no máximo igual a $\pi\eta_u$. [Moin e Mahesh \(1998\)](#) afirmam que há vários relatos na literatura de casos em que medições experimentais concordaram com os resultados de simulações diretas espectrais que adotaram grade com espessura igual a algumas vezes as microescalas.

Métodos numéricos menos acurados demandam uma resolução mais fina. De acordo com [Moin e Mahesh \(1998\)](#), diferenças finitas de segunda ordem demandam a metade da espessura da grade usada por métodos espectrais. O método utilizado no presente texto é de quarta ordem, e deve requerer resolução semelhante àquela usada em métodos espectrais. Além disso, [Juneja e Pope \(1996\)](#) afirmam que uma maior resolução espacial é necessária conforme aumenta-se a ordem dos momentos que deseja-se obter a partir dos dados.

Em resumo, é necessário que a resolução espacial seja suficiente para que a maior parte da dissipação de energia ocorra em escalas superiores à espessura da malha. Uma resolução insuficiente causa um acúmulo de energia no escoamento e uma consequente superestimativa dos fluxos de calor ([Grötzbach, 1983](#)). Felizmente, a dissipação de energia em escalas inferiores a η_u costuma ser desprezível, de forma que não é necessário resolver as microescalas em si. O resultado é uma grande redução no custo computacional às custas de uma pequena perda de acurácia nos resultados. Neste estudo, malhas de diferentes espessuras h foram testadas. Para verificar a convergência de malha, os espectros de frequência foram calculados para se verificar que a resolução utilizada foi suficiente para dissipar praticamente toda a energia do escoamento. Também verificou-se como as estatísticas do escoamento foram afetadas pelos valores de h .

O passo de tempo também deve ser pequeno o suficiente para resolver as microescalas de Kolmogorov τ_u^* , dada por (3.83), da temperatura, τ_u^*/\sqrt{Pr} , e do escalar passivo, τ_u^*/\sqrt{Sc} . Entretanto, os critérios de estabilidade numérica limitam o passo de tempo além das microescalas. Usando, por exemplo, o caso em que $Sc > Pr$, a microescala do escalar passivo deve ser da ordem de

$$\tau_q^* \sim \frac{\tau_u^*}{\sqrt{Sc}} \sim Ra^{-3/4} Pr^{-1/4} Sc^{-1/2}.$$

Para que o número de Courant seja unitário, se a espessura da malha for $h \sim \eta_u^*/\sqrt{Sc}$, o passo

de tempo deve ser da ordem de

$$\frac{h}{\sqrt{\text{RaPr}}} \sim \frac{\eta_u^*}{\sqrt{\text{RaPrSc}}} \sim \text{Ra}^{-7/8} \text{Pr}^{-1/8} \text{Sc}^{-1/2}$$

Assim, a razão entre a menor microescala de tempo e passo de tempo que torna o número de Courant unitário é da ordem de $\text{Ra}^{1/8} \text{Pr}^{-1/8}$, que é superior à unidade sempre que $\text{Ra} > \text{Pr} = 10$. No caso em que $\text{Sc} < \text{Pr}$, basta substituir o número de Schmidt pelo número de Prandtl nos cálculos acima, o que leva ao mesmo resultado. Conclui-se que fazer o número de Courant ser inferior à unidade implica em utilizar um passo de tempo inferior à menor microescala.

4.5.4 Camadas-limite

Devido às condições de contorno de Dirichlet, fortes gradientes de temperatura e do escalar passivo são esperados próximo às placas, caracterizando a formação de camadas-limite. Uma baixa resolução vertical das camadas-limite térmicas afeta principalmente o transporte de calor entre as placas, quantificado adimensionalmente através do número de Nusselt ([Grötzbach, 1983](#)). Embora a maior parte dos autores também esteja preocupada com a resolução de camadas-limite cinemáticas, este não é nosso caso: os gradientes da componente horizontal da velocidade são suavizados próximo às placas graças às condições de contorno de Neumann adotadas.

A espessura média adimensional da camada-limite térmica no caso de placas fixas é $(2\text{Nu}_\theta)^{-1}$ ([Shishkina et al., 2010](#)). Enquanto [Grötzbach \(1983\)](#) indica que usar três pontos de grade no interior da camada-limite é suficiente, as simulações de [Stevens et al. \(2010\)](#) incluem entre seis e 42 pontos nesta região. Na realidade, o número de pontos necessário aumenta com um aumento do número de Rayleigh, não sendo possível estabelecer um critério fixo em termos da quantidade de pontos.

[Shishkina et al. \(2010\)](#) recomendam que, para resolver as camadas-limite térmicas para $\text{Pr} > 3$, a espessura vertical da grade atenda à condição

$$h \lesssim 0,754 \text{Nu}_\theta^{-3/2}.$$

Segundo a teoria de [Grossmann e Lohse \(2000\)](#), para $\text{Ra} \lesssim 10^{11}$ e $\text{Pr} \gtrsim 1$,

$$\text{Nu}_\theta \sim 0,33 \text{Ra}^{1/4} \text{Pr}^{-1/12} \quad \Rightarrow \quad h \lesssim \left(3,977 \text{Pr}^{1/8}\right) \text{Ra}^{-3/8}.$$

Já a microescala de Batchelor é, das equações (3.83) e (3.85),

$$\eta_B^* \sim \left(\text{Pr}^{-1/8}\right) \text{Ra}^{-3/8}.$$

Em particular, para $\text{Pr} = 10$, o critério da camada-limite exige

$$h \lesssim 5,3 \text{Ra}^{-3/8},$$

enquanto

$$\eta_B^* \sim 0,75 \text{Ra}^{-3/8}.$$

Assim, se adotarmos $h \lesssim 7\eta_B^*$, a condição de resolução mínima para a camada-limite térmica de [Shishkina et al. \(2010\)](#) é satisfeita.

Note que há diversas incertezas envolvidas nos cálculos referentes à camada-limite térmica acima. Primeiramente, tais relações são válidas apenas para as ordens de magnitude dos termos. Além disso, elas se referem a RBC com condições de contorno de placas fixas, diferindo

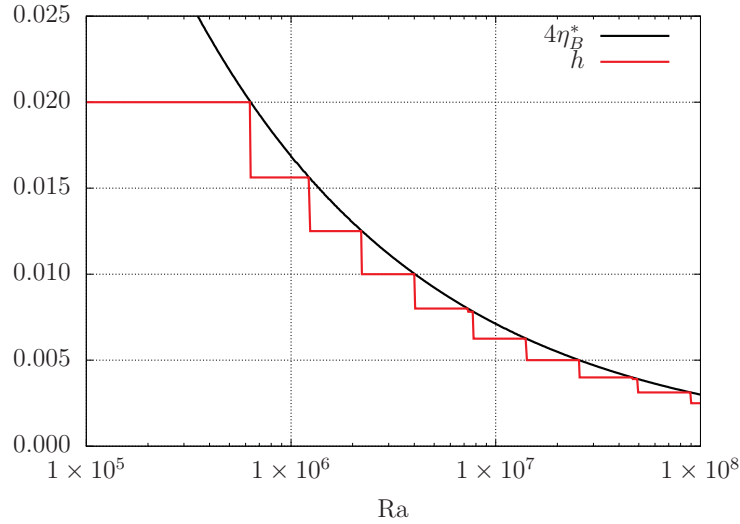


Figura 4.5: Espessura h da malha numérica (em vermelho) e $\chi_\theta = 4$ vezes a microescala de temperatura (em preto) em função do número de Rayleigh.

do escoamento simulado no presente estudo. Também é necessário lembrar que o critério de [Shishkina et al. \(2010\)](#) envolve quantidades médias, enquanto a intensidade dos gradientes instantâneos pode ser diferente daquela dos gradientes médios. Análises visuais dos perfis instantâneos e médios das variáveis do escoamento devem ser suficientes para determinar se as camadas-limite foram bem resolvidas.

4.5.5 Resumo

Para que o domínio seja dividido em um número inteiro de intervalos, determina-se que a espessura da malha deve ser da forma

$$h = \frac{1}{N_z} = \frac{1}{2^n 5^m}, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots,$$

o que também garante que a representação decimal de h é finita e, consequentemente, pode ser implementada computacionalmente com exatidão. Assim,

$$h = \frac{\chi_\theta \eta_u^*}{\sqrt{\text{Pr}}} = \frac{\chi_q \eta_u^*}{\sqrt{\text{Sc}}}, \quad \eta_u^* \sim \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Ra}} \right)^{3/8}, \quad (4.33)$$

ou seja, permite-se que a espessura da malha seja χ_θ vezes a microescala da temperatura, e χ_q vezes a microescala do escalar passivo.

Os valores máximos de tais fatores que fornecem uma resolução adequada devem ser identificados empiricamente e, em princípio, podem ser função da realização do escoamento, de Ra , e de Pr , à medida que $\text{Re} \sim \sqrt{\text{Ra}/\text{Pr}}$ e $\varepsilon^* \sim \mathcal{U}^{*3}$ (e, consequentemente, $\eta_u^* \sim (\text{Pr}/\text{Ra})^{3/8}$) se tornam aproximações melhores. Além disso, definiu-se $h = 0,02$ como a menor resolução aceitável. Isso garante que, mesmo para números de Rayleigh pequenos, o escoamento é resolvido em pelo menos 49 posições verticais entre as placas. A figura 4.5 apresenta a espessura da malha em função de Ra para $\chi_\theta = 4$.

Na presença do escalar passivo, destaca-se que χ_θ e χ_q estão relacionados através de

$$\chi_q = \text{Le}^{-1/2} \chi_\theta.$$

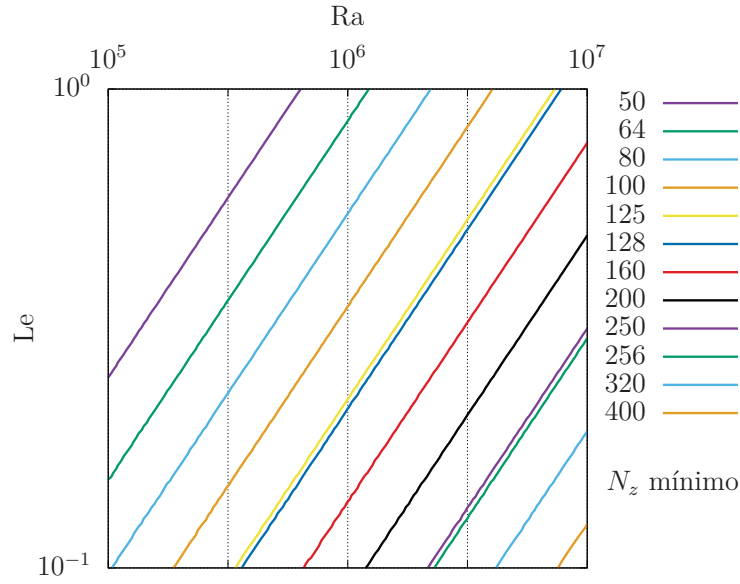


Figura 4.6: Espessura da malha necessária (dada em termos de $N_z = h^{-1}$ pelas cores) em função de Ra e $Le < 1$, situação em que a microescala do escalar passivo é inferior à da temperatura.

Quando $Le < 1$, o escalar passivo possui a menor difusividade molecular, e sua microescala é o que mais restringe a espessura da malha. O número mínimo de pontos entre as placas N_z está representado em função dos números de Rayleigh e Lewis na figura 4.6. É necessária uma resolução maior quando maior (menor) os valores de Ra (Le).

De maneira similar ao que foi feito para a espessura da malha, definiu-se que o passo de tempo deve ser da forma

$$\Delta t = \frac{1}{2^{n5m}}, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots$$

Os critérios de estabilidade numérica estabelecem que

$$\Delta t \leq \min \left(\frac{h}{\sqrt{RaPr}}, \frac{h^2}{4Pr}, \frac{h^2}{4Le} \right).$$

Conforme demonstrado na seção 4.5.3, tais critérios também são suficientes para que as microescalas de tempo sejam resolvidas.

Usando estes critérios, e estabelecendo-se $\chi_\theta = 4$, obtém-se a tabela 4.1 para os parâmetros da simulação numérica de RBC contendo um escalar passivo cujo número de Lewis seja maior ou igual à unidade. Destaca-se que atualmente existem computadores muito mais eficientes do que aqueles que estão sendo utilizados neste estudo e sobre os quais basearam-se as estimativas dos tempos de processamento. Tais estimativas também estão representadas graficamente na figura 4.7.

Tabela 4.1: Resoluções espacial (em termos de $N_z = h^{-1}$) e temporal necessárias (considerando $\chi_\theta = 4$, $Le \geq 1$ e $\Gamma = 5$) para diferentes números de Rayleigh. O tempo de processamento refere-se a uma simulação de duração adimensional unitária executada em um computador com quatro processadores Intel Core i7 na Universidade Federal do Paraná.

Ra_{max}	N_z	Δt	Tempo de processamento
$6,35 \times 10^5$	50	$1,0000 \times 10^{-5}$	15 min
$1,23 \times 10^6$	64	$4,0000 \times 10^{-6}$	1 h
$2,22 \times 10^6$	80	$2,5000 \times 10^{-6}$	2 h 30 min
$4,03 \times 10^6$	100	$1,5625 \times 10^{-6}$	6 h 30 min
$7,31 \times 10^6$	125	$8,0000 \times 10^{-7}$	19 h 30 min
$7,79 \times 10^6$	128	$8,0000 \times 10^{-7}$	20 h 30 min
$1,41 \times 10^7$	160	$5,0000 \times 10^{-7}$	2 d 3 h
$2,56 \times 10^7$	200	$3,1250 \times 10^{-7}$	5 d 8 h
$4,64 \times 10^7$	250	$1,6000 \times 10^{-7}$	16 d 7 h
$4,94 \times 10^7$	256	$1,6000 \times 10^{-7}$	17 d
$8,97 \times 10^7$	320	$1,0000 \times 10^{-7}$	1 mês 12 d

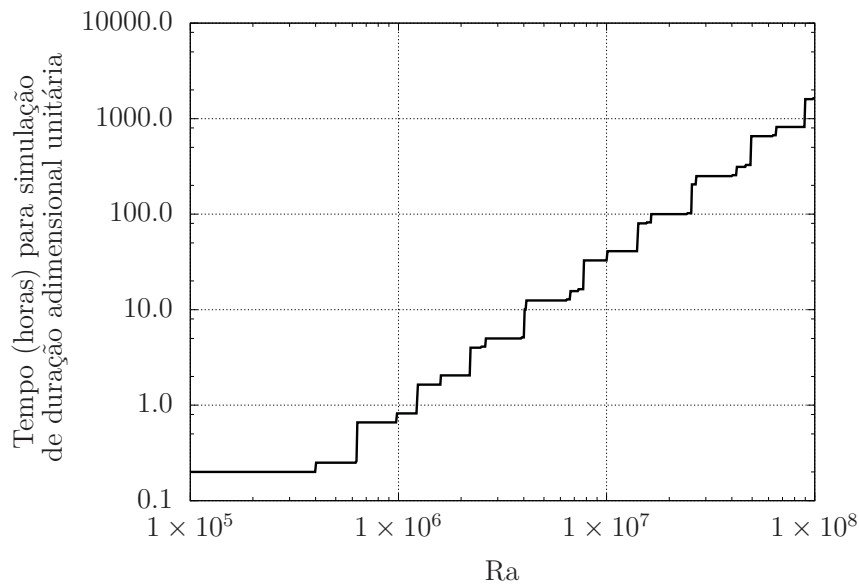


Figura 4.7: Tempo de processamento estimado (considerando $\chi_\theta = 4$, $Le \geq 1$ e $\Gamma = 5$) para simular um escoamento de duração adimensional unitária em um computador com quatro processadores Intel Core i7 na Universidade Federal do Paraná.

Capítulo 5

Resultados sobre a dinâmica do escoamento

Neste capítulo, foram apresentados os resultados sobre a dinâmica do escoamento, ou seja, sobre o comportamento de U^* , W^* e Θ^* . Os resultados referentes ao escalar passivo e à similaridade entre os escalares foram discutidos no capítulo 6.

5.1 Análise qualitativa dos regimes de escoamento

Em um primeiro momento, os resultados foram discutidos de maneira qualitativa, através da descrição dos diferentes padrões de escoamento observados. As soluções numéricas obtidas no presente estudo foram comparadas com o diagrama de [Busse \(1978\)](#), o qual descreve as transições entre diferentes regimes de escoamento em RBC em função de Ra e Pr . Entretanto, é importante ter em mente que, por ter sido desenvolvido com base em experimentos, tal diagrama corresponde a um escoamento tridimensional com condições de contorno de não-deslizamento, diferente daquele simulado numericamente neste estudo.

Nas figuras, a temperatura do escoamento foi expressada através da variável $\Theta^* - \Theta_0^*$, o desvio em relação à temperatura da placa inferior adimensionalizado em termos da diferença de temperatura entre as placas. Destaca-se que tal variável já inclui o estado de referência, pois $\Theta^* - \Theta_0^* = \Theta^* - z^*$. Assim, graças às condições de contorno, $\Theta^* - \Theta_0^*$ vale zero na placa inferior e -1 na placa superior.

5.1.1 Situação estática

Verificou-se que o equilíbrio estático, ilustrado na figura 5.1, é reestabelecido após ser perturbado sempre que $Ra < Ra_c \approx 657,51$. Tal resultado está de acordo com a análise de estabilidade linear desenvolvida na seção 3.3.2. O diagrama de [Busse \(1978\)](#) indica que, para $Pr = 10$, o equilíbrio estático ocorre até $Ra \approx 1707,76$, valor que também é obtido através de uma análise de estabilidade linear se forem aplicadas condições de contorno de não-deslizamento ([Chandrasekhar, 1970](#), p. 36).

As séries temporais na figura 5.2 mostram, para $Ra = 600$, como a perturbação inicialmente imposta sobre Θ^* faz com que o campo de velocidade saia momentaneamente da condição de equilíbrio. Entretanto, todas as perturbações decaem para zero até o instante $t^* \approx 0,3$. Assim, a solução numérica atinge o regime permanente correspondente à solução trivial do sistema (4.1)–(4.6), em que todas as flutuações de Boussinesq são nulas e o estado de referência comporta-se como uma solução estável das equações de conservação.

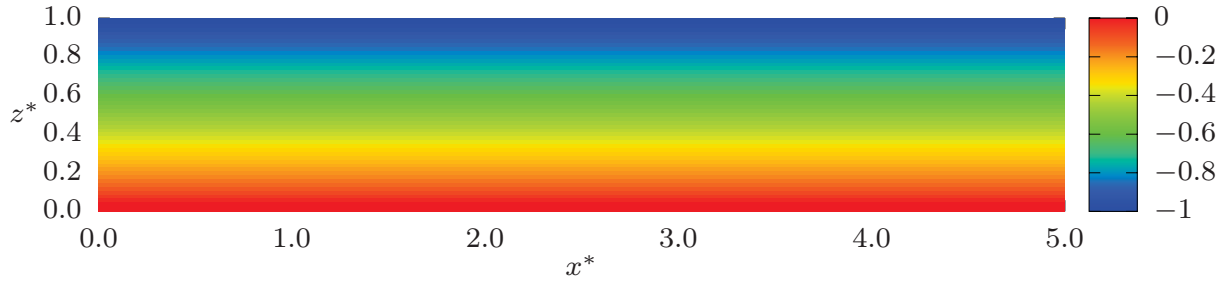


Figura 5.1: Campo de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ em regime permanente para $Ra < Ra_c$ (situação estática).

Nesta situação, o perfil vertical de temperatura, dado pela equação (3.17), é linear e independe da coordenada horizontal. Há apenas transporte de calor por condução, já que o fluido permanece imóvel. Consequentemente, $Nu_\theta = 1$ e $Re = 0$.

5.1.2 Convecção estacionária

O sistema atingiu regimes permanentes diferentes da solução trivial para valores de Ra maiores que Ra_c , mas ainda relativamente baixos. Não foi possível identificar um único limite superior para Ra a partir do qual soluções estacionárias tornam-se instáveis. Por exemplo, para $Ra = 2 \times 10^4$, alguns testes forneceram soluções estacionárias, enquanto outros forneceram soluções não-permanentes. Tais testes diferiram entre si apenas pelas condições iniciais (aleatórias) aplicadas sobre Θ^* . Por outro lado, não ocorreu nenhum caso de convecção estacionária para os testes feitos com $Ra \geq 4 \times 10^4$. De acordo com Busse (1978), verificou-se experimentalmente que, para valores moderados e elevados de Pr (o que inclui $Pr = 10$), e $Ra_c < Ra \lesssim 2 \times 10^4$, forma-se uma configuração conhecida como “convecção de rolo” (*roll convection*), situação em que o escoamento é estacionário e essencialmente bidimensional. Convecção estacionária, porém tridimensional, acontece para $2 \times 10^4 \lesssim Ra \lesssim 3,6 \times 10^4$ (se $Pr = 10$).

Vários escoamentos em regime de convecção estacionária estão ilustrados na figura 5.3. Os tamanhos dos vetores velocidade que aparecem nas figuras deste texto foram normalizados por um fator proporcional à velocidade máxima que ocorre em cada escoamento, de tal forma que os vetores aparecem com tamanhos semelhantes em todas as figuras. Entretanto, destaca-se que tal velocidade máxima é cada vez maior conforme aumenta-se Ra . Esta questão é discutida quantitativamente em termos do número de Reynolds na seção 5.2.2.

Através de uma análise visual da figura 5.3, percebe-se que, em quase todos os casos ilustrados, formou-se um padrão que se repete duas vezes ao longo de x^* . Isso sugere que a razão de aspecto utilizada, $\Gamma = 5$, é suficientemente grande para conter as estruturas mais energéticas que ocorreriam caso $\Gamma \rightarrow \infty$. Entretanto, a limitação do domínio computacional faz com que o escoamento simulado via DNS deva se adaptar de maneira a desenvolver um número inteiro de estruturas no interior do mesmo. Em outras palavras, os números de onda (na direção horizontal) que compõem as variáveis do escoamento devem ser múltiplos de Γ^{-1} , uma restrição que não existe no caso idealizado em que $\Gamma \rightarrow \infty$. Ademais, em algumas simulações, tais como o caso $Ra = 8 \times 10^3$ ilustrado na figura 5.3, as estruturas do escoamento não se repetiram exatamente, e formaram-se células convectivas de diferentes tamanhos.

Também percebe-se que as regiões em que encontram-se correntes ascendentes de fluido quente, ou correntes descendentes de fluido frio, tornam-se cada vez mais estreitas conforme aumenta-se Ra . Ao mesmo tempo, cresce a região do escoamento em que a temperatura é apro-

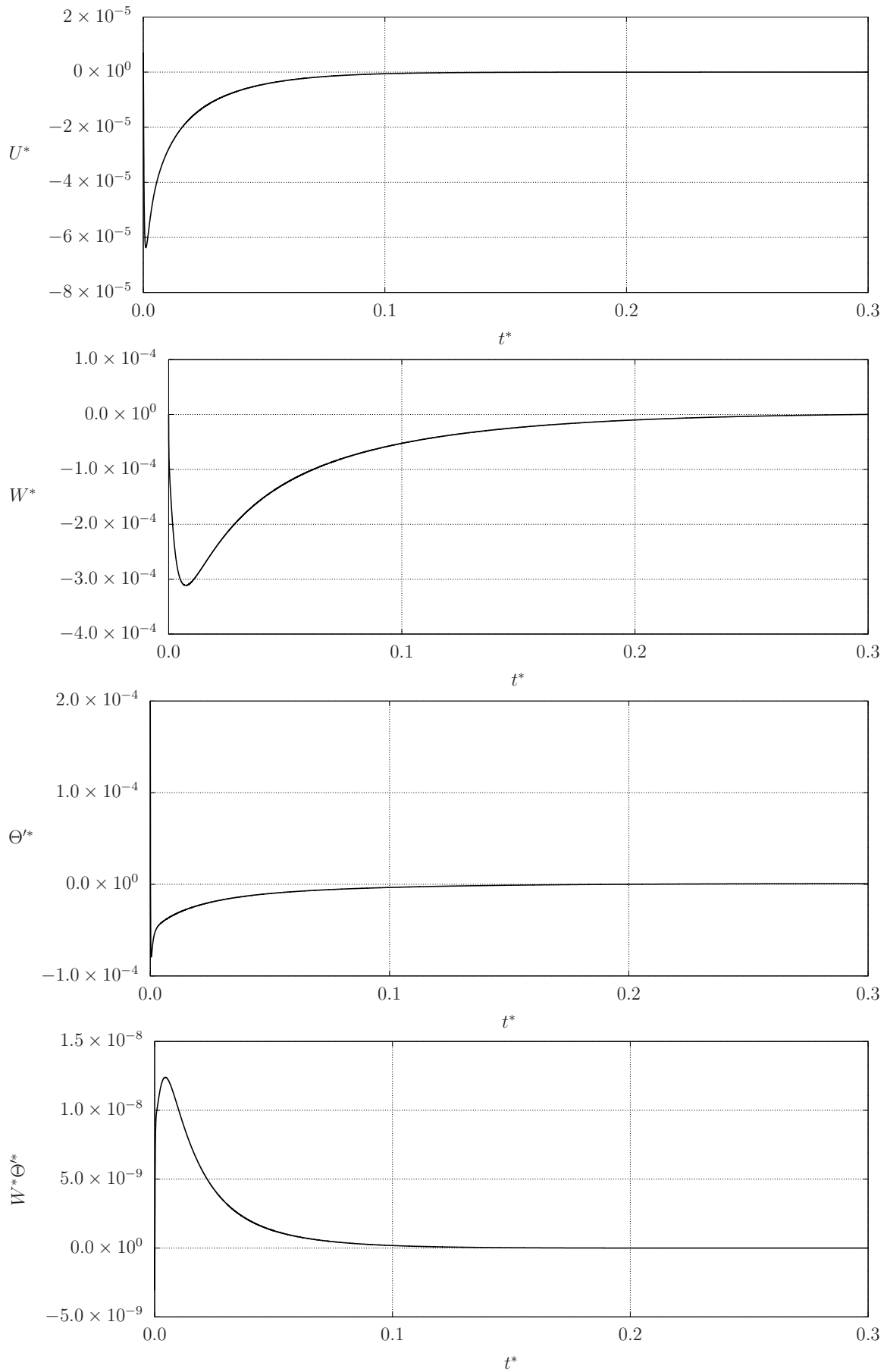


Figura 5.2: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 6 \times 10^2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis na situação estática.

ximadamente homogênea e $\Theta^* - \Theta_0^* = -1/2$, o que é representado pela cor verde na figura 5.3. Tal valor corresponde à temperatura média entre as placas, $\Theta = \Theta_0 - \Delta\Theta/2$. Além disso, nota-se que, apesar de permanecerem fixas ao longo do tempo, as posições horizontais das células convectivas variam entre as simulações; não há regiões preferenciais de desenvolvimento de centros de ascensão ou subsidência (conforme esperado, dadas as condições de contorno uniformes em x^* e a condição inicial aleatória).

Finalmente, é possível perceber da figura 5.3 que, conforme aumenta-se Ra , a intensidade dos gradientes verticais de temperatura próximo às placas também aumenta e, portanto, a espessura das camadas-limite térmicas nestas regiões diminui. Shishkina et al. (2010) determinaram que tal espessura deve ser da ordem de $(2Nu_\theta)^{-1}$, o que não foi testado no presente estudo de maneira quantitativa. Entretanto, os resultados obtidos não parecem apresentar comportamento excessivamente discrepante de tal estimativa teórica, visto que Nu_θ cresce conforme aumenta-se Ra (ver seção 5.2.1).

Séries temporais típicas para $Ra = 4 \times 10^3$ foram apresentadas na figura 5.4. Diferentemente do que ocorre para $Ra < Ra_c$, em regime de convecção estacionária, as variáveis atingem valores permanentes não-nulos. No caso ilustrado, isso ocorre até o instante $t^* \approx 10,0$, bastante superior à duração do período transiente no caso (em que $Ra = 6 \times 10^2$) apresentado na figura 5.2, o qual se estende apenas até $t^* \approx 0,3$. Destaca-se que esta é uma observação específica para tais valores de Ra , não indicando uma relação monotonicamente crescente entre a duração do período transiente e este parâmetro.

5.1.3 Regime oscilatório

Em todas as simulações realizadas com $Ra = 4 \times 10^4$, o escoamento apresentou comportamento oscilatório, aparentemente periódico, ao longo do tempo. Neste texto, evitou-se utilizar o tempo “periódico” para descrever tal regime devido à impossibilidade prática de verificar se as razões entre as frequências que compõem tal escoamento são números racionais, o que seria necessário de acordo com a definição de periodicidade de Bendat e Piersol (2010, p. 6). Portanto, na falta de um termo melhor, optou-se por designar este regime como “oscilatório”.

O diagrama de transições de Busse (1978) mostra que um regime oscilatório de fato ocorre em experimentos para fluidos com $Pr = 10$ quando $3,6 \times 10^4 \lesssim Ra \lesssim 6,6 \times 10^4$. Para números de Rayleigh ainda mais elevados, entretanto, diferentes frequências de oscilação tornam-se importantes, de tal forma que o escoamento torna-se turbulento. Os resultados deste estudo para o número de Rayleigh simulado em seguida, $Ra = 8 \times 10^4$, concordaram com tais resultados experimentais.

Para $Ra = 4 \times 10^4$, o escoamento caracterizou-se pela formação de dois pares de estruturas convectivas, as quais alternaram entre dois estados extremos ilustrados (aproximadamente) na figura 5.5. Percebe-se que, apesar das oscilações, as correntes ascendentes de fluido aquecido e as correntes descendentes de fluido frio praticamente não foram deformadas ou deslocadas na direção horizontal, mantendo-se essencialmente verticais e nas mesmas posições x^* . Além disso, é útil definir m como o número de pares de células convectivas formadas em uma simulação numérica. Assim, no caso $Ra = 4 \times 10^4$, $m = 2$ em todos os testes realizados. Destaca-se que m não é definido a priori, mas é consequência dos valores arbitrados dos parâmetros adimensionais e das condições iniciais aleatórias fornecidas ao sistema.

Séries temporais típicas para $Ra = 4 \times 10^4$ foram apresentadas na figura 5.6. A partir de $t^* \approx 3,0$, todas as variáveis passaram a apresentar comportamento aparentemente periódico, e um regime estatisticamente estacionário parece ser atingido. Nota-se que, neste caso, o período transiente possui duração mais curta do que no caso $Ra = 4 \times 10^3$ apresentado na figura 5.4

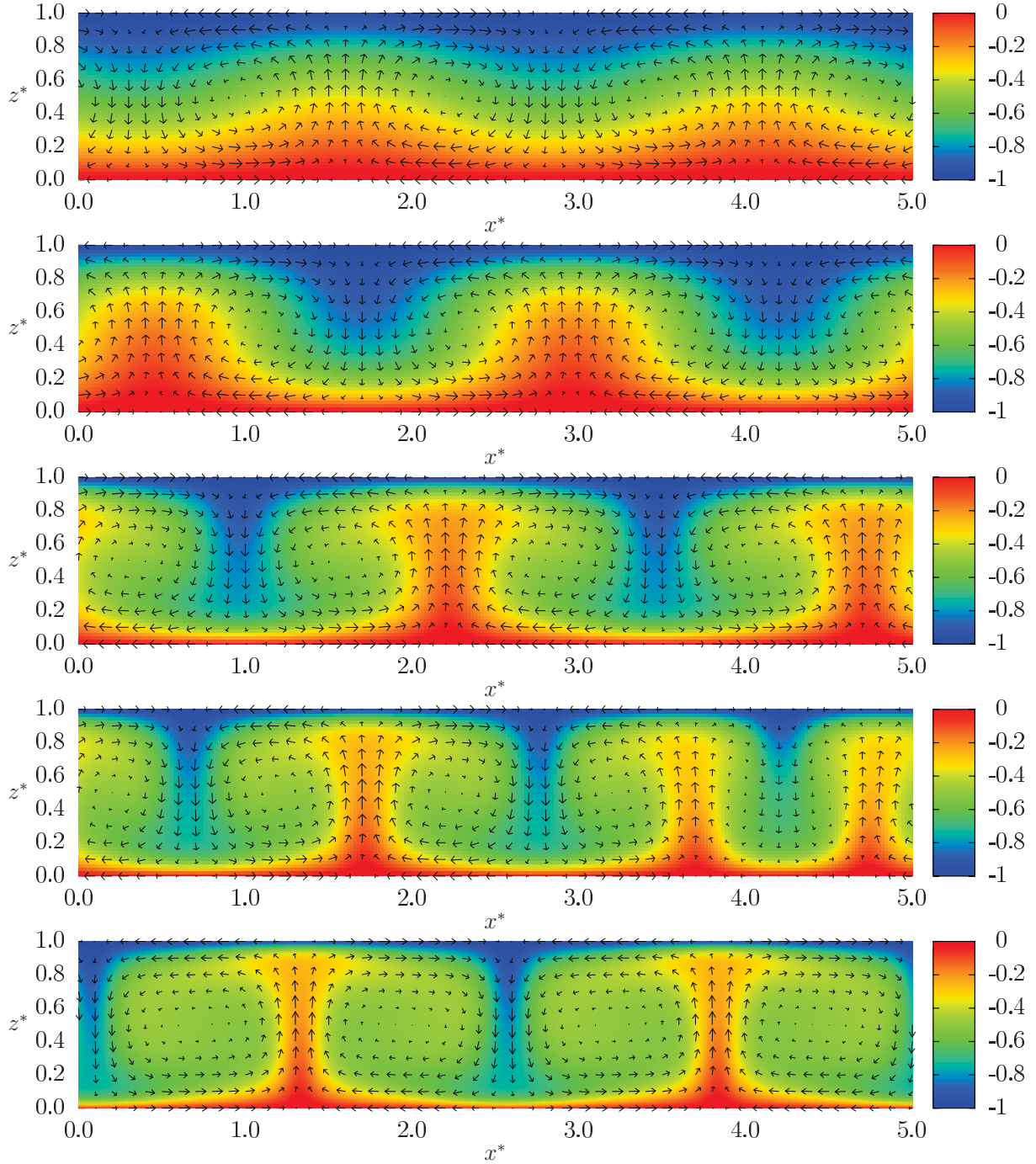


Figura 5.3: Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) em regime permanente, respectivamente (de cima para baixo) para $Ra = 7 \times 10^2$, $Ra = 1 \times 10^3$, $Ra = 4 \times 10^3$, $Ra = 8 \times 10^3$ e $Ra = 2 \times 10^4$, determinados via DNS. Os módulos dos vetores que aparecem nas figuras foram normalizados por diferentes fatores de forma a apresentar tamanhos semelhantes, muito embora a velocidade do escoamento aumente conforme aumenta-se Ra .

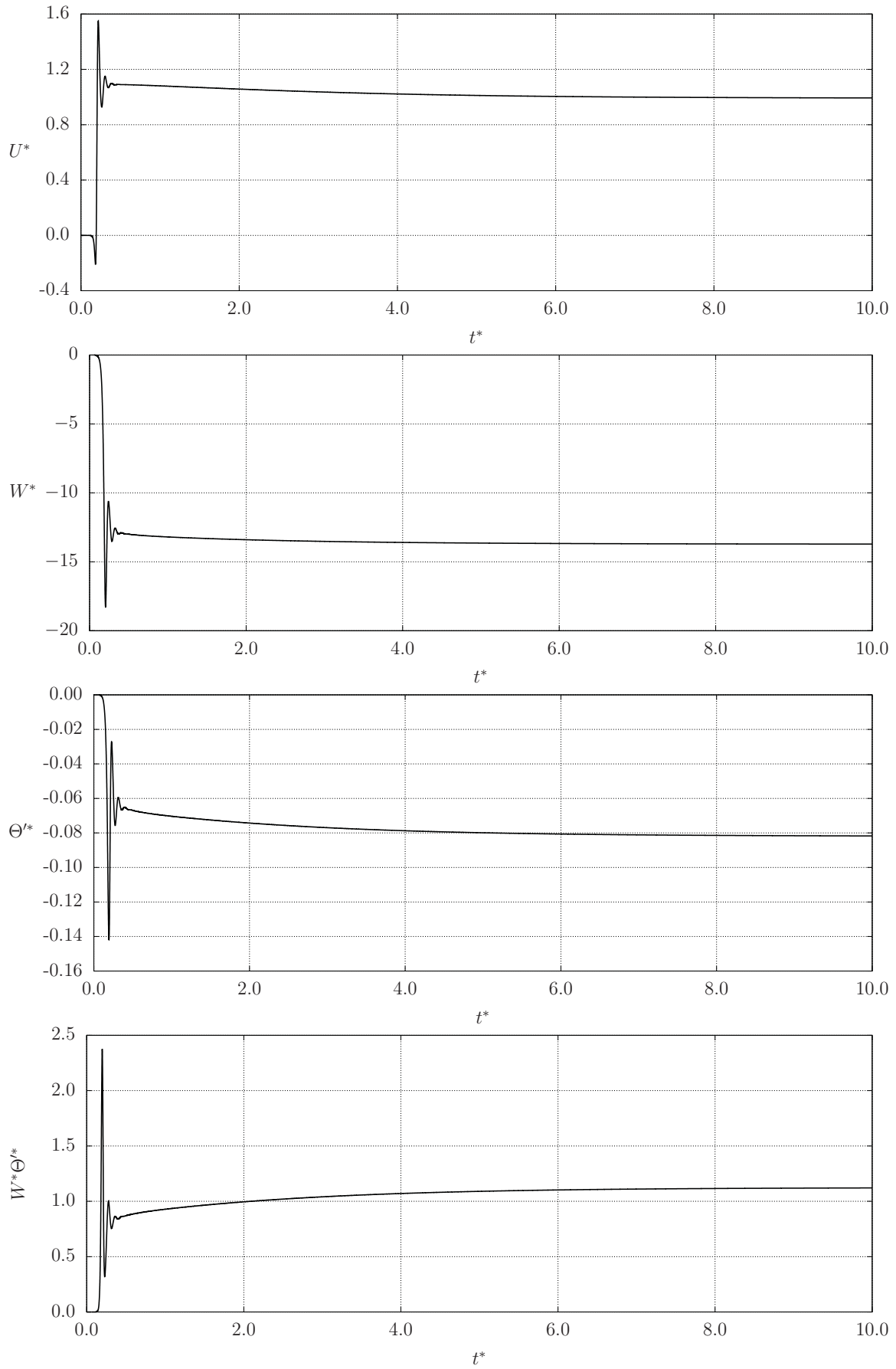


Figura 5.4: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 4 \times 10^3$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em convecção estacionária.

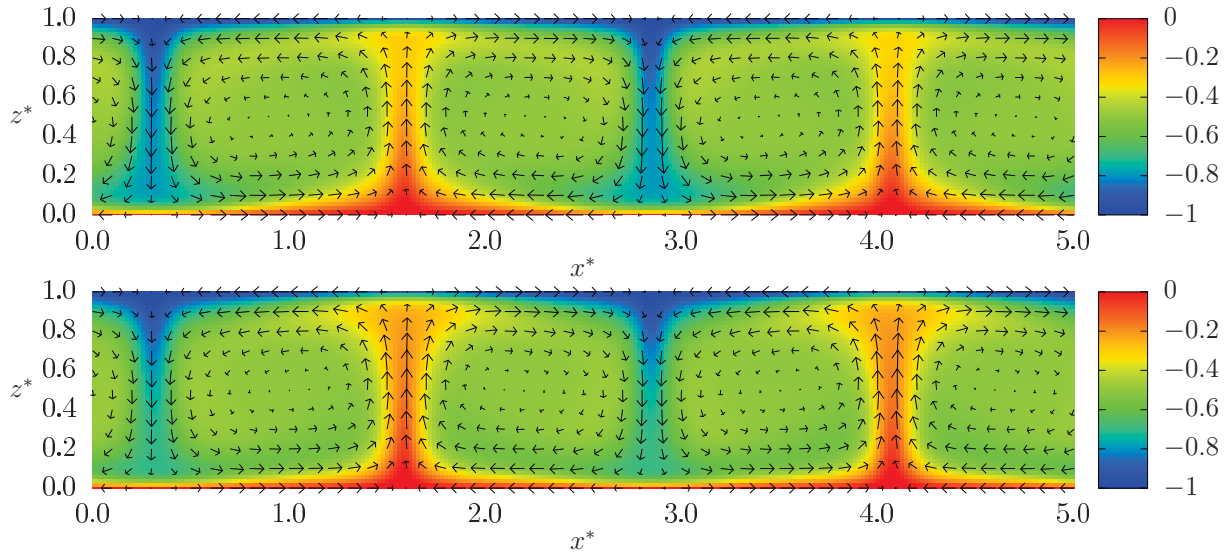


Figura 5.5: Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) em regime oscilatório para $Ra = 4 \times 10^4$, determinados via DNS, para os instantes $t^* = 19,890$ (acima) e $t^* = 19,940$ (abaixo), ilustrando dois estados extremos (aproximadamente) entre os quais oscila o escoamento.

(em que tal período se estende até $t^* \approx 10,0$), mas mais longa do que no caso $Ra = 6 \times 10^2$ apresentado na figura 5.2 (em que o regime permanente é atingido já em $t^* \approx 0,3$).

5.1.4 Regime turbulento

Para $Ra = 8 \times 10^4$, número de Rayleigh do escoamento simulado em seguida, e para os demais valores ainda maiores testados, observou-se em geral um comportamento caótico no escoamento, sem que nenhum regime permanente ou periódico fosse atingido. Tal resultado está de acordo com a previsão baseada em evidências experimentais de Busse (1978), segundo a qual o regime turbulento se inicia a partir de $Ra \approx 6,6 \times 10^4$ para $Pr = 10$.

Em alguns casos, ilustrados na figura 5.7, desenvolveram-se dois pares de células convectivas ($m = 2$). Diferentemente do que ocorria no regime oscilatório apresentado na figura 5.5, entretanto, as correntes ascendentes de fluido quente e as correntes descendentes de fluido frio oscilam bastante na direção horizontal, tendo suas formas continuamente deformadas e suas posições horizontais médias progressivamente alteradas.

Na maior parte dos escoamentos neste regime caótico, por outro lado, desenvolveu-se apenas um par de células convectivas com sentidos opostos ($m = 1$, situação em que há apenas um único período completo que não se repete ao longo de Γ). Esta configuração, ilustrada na figura 5.8 para diferentes números de Rayleigh, é caracterizada pela presença de um único centro de ascensão e um único centro de subsidência ao longo das placas. As posições x^* de tais centros (e, portanto, das estruturas convectivas como um todo) variam continuamente ao longo do tempo em cada simulação, o que está de acordo com a ideia de que os mesmos não possuem regiões preferenciais de desenvolvimento, sugerindo uma possível homogeneidade estatística do problema na direção horizontal. Supondo que também há estacionariedade estatística, isto deve se manifestar na prática através de médias temporais independentes de x^* quando calculadas sobre séries de duração suficientemente longa.

A tabela 5.1 resume a frequência de ocorrência de cada uma das duas configurações observadas para diferentes números de Rayleigh associados a regimes não-permanentes. Foram

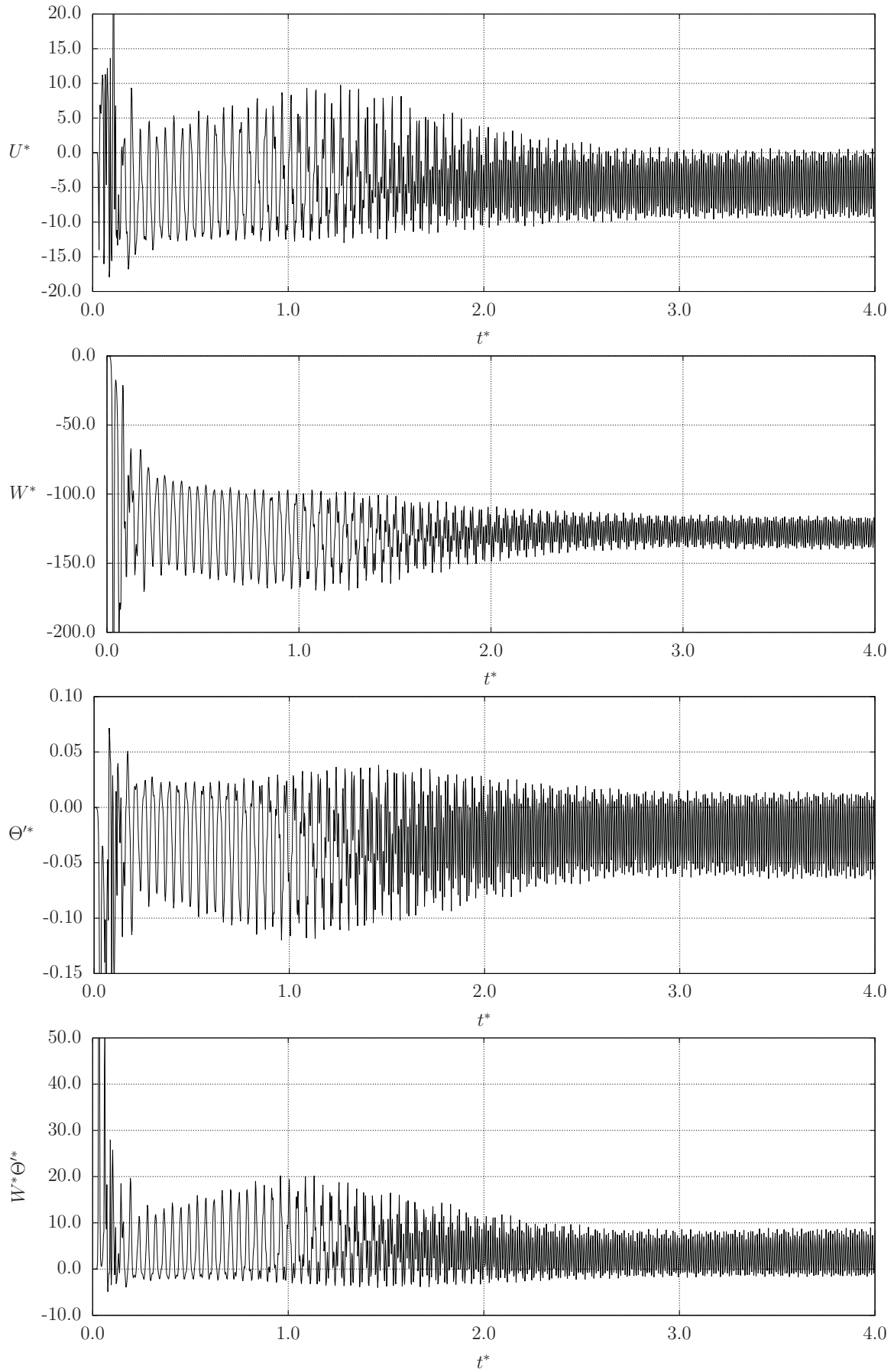


Figura 5.6: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 4 \times 10^4$ e $m = 2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime oscilatório.

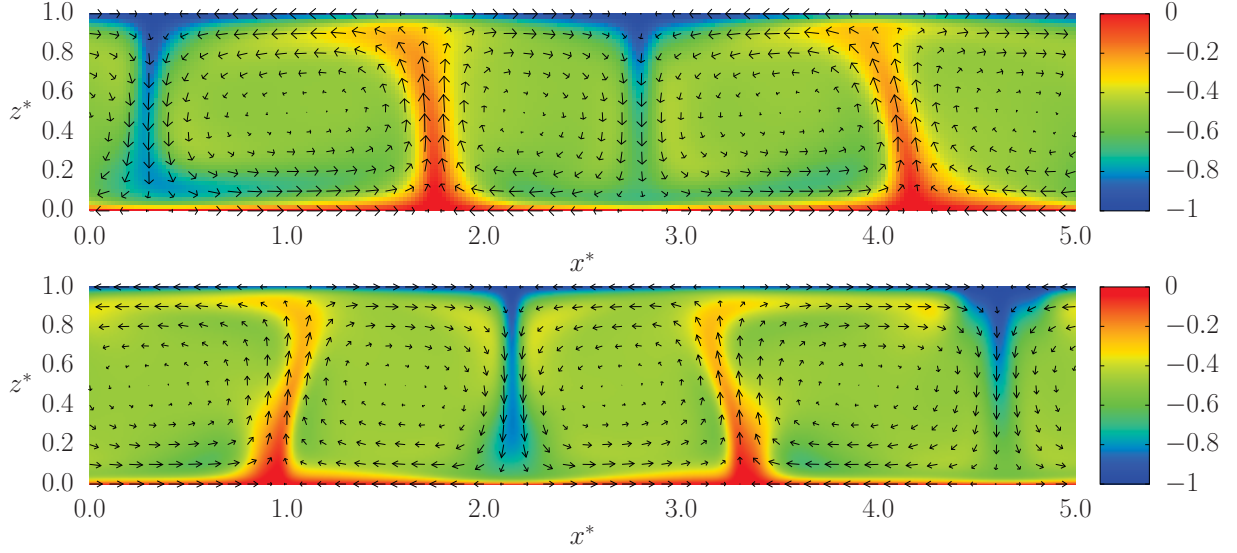


Figura 5.7: Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) instantâneos em regime turbulento, respectivamente para $Ra = 8 \times 10^4$ e $Ra = 2 \times 10^5$, em escoamentos com $m = 2$, obtidos via DNS.

Tabela 5.1: Número m de pares de estruturas convectivas formadas em diferentes simulações numéricas. Para cada valor de Ra , foram realizados 7 testes com diferentes condições iniciais (aleatórias).

Ra	$m = 2$	$m = 1$
4×10^4	7	0
8×10^4	4	3
2×10^5	2	5
1×10^6	0	7

simuladas 7 realizações do escoamento para cada valor testado de Ra , entre as quais variou-se a condição inicial (aleatória) e o número de Lewis (que por sua vez afeta somente o escalar passivo, mas não a dinâmica do escoamento ou o valor de m). Os resultados tornam evidente o fato de que cresce a probabilidade da ocorrência de $m = 1$ conforme aumenta-se o número de Rayleigh. De fato, [Grötzbach \(1983\)](#) afirma que os comprimentos de onda verificados experimentalmente aumentam conforme aumenta-se o número de Rayleigh.

Ademais, em um dos testes realizados com $Ra = 8 \times 10^4$ no presente estudo, inicialmente desenvolveram-se dois pares de células convectivas, até que as duas térmicas se colapsaram, resultando em um único par de tais estruturas, condição que se manteve durante o restante da simulação (figura 5.9). Isto sugere que a configuração em que $m = 1$ é mais estável do que a configuração em que $m = 2$. Também destaca-se que, quando $m = 1$, as estruturas presentes no escoamento são as maiores possíveis dado Γ . Consequentemente, não é mais possível saber se a razão de aspecto adotada é grande o suficiente para conter as estruturas mais energéticas que ocorreriam caso $\Gamma \rightarrow \infty$: é possível que a utilização de uma razão de aspecto $\Gamma > 5$ fornecesse comprimentos de onda fundamentais maiores. Portanto, os casos em que $m = 2$ devem apresentar menos efeitos de fronteira, de maneira que, nas situações em que $m = 1$, é necessário considerar a importância do efeito das condições de contorno periódicas sobre os resultados, medida por exemplo através do cálculo de funções de autocorrelação na direção x^* (ver seção 5.3.3). Além disso, destaca-se que o tamanho do domínio e as condições de contorno

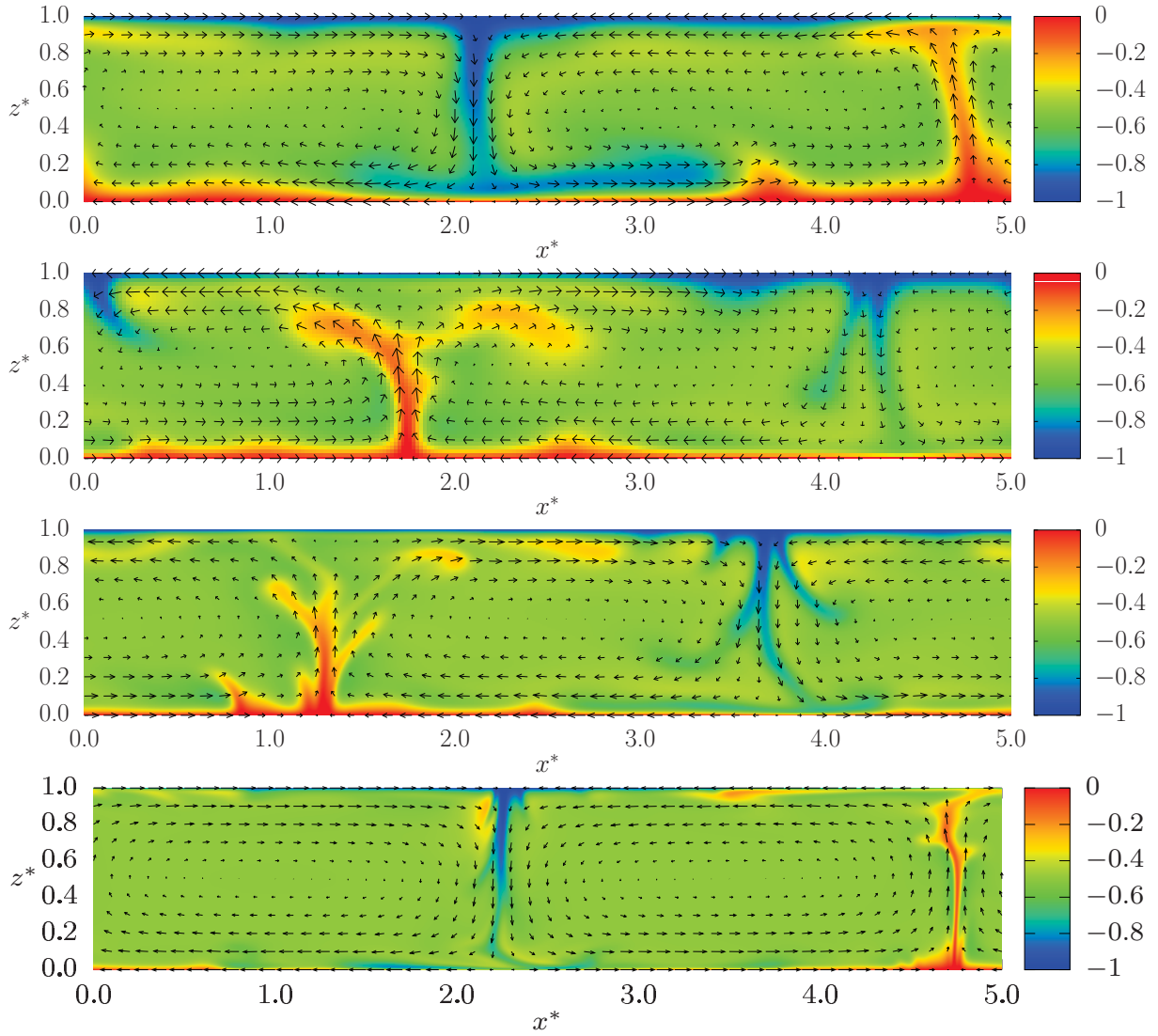


Figura 5.8: Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) instantâneos em regime turbulento, respectivamente para $Ra = 8 \times 10^4$, $Ra = 2 \times 10^5$, $Ra = 1 \times 10^6$ e $Ra = 1 \times 10^7$, em escoamentos com $m = 1$, obtidos via DNS.

periódicas limitam o comprimento em x^* das estruturas a Γ e $\Gamma/2$, mesmo que o escoamento tente produzir estruturas de tamanho horizontal intermediário.

Conforme descrito na literatura (Ahlers et al., 2009), pode-se perceber o desenvolvimento de uma certa variedade de estruturas em RBC quando Ra é grande o suficiente. Nos escoamentos ilustrados na figura 5.8, nota-se a presença de uma circulação de larga escala, constituída por duas células convectivas com sentido opostos em que o campo de velocidades é aproximadamente horizontal, com exceção das regiões em que tais células se encontram, onde forma-se uma térmica (corrente ascendente de fluido aquecido) e uma corrente descendente de fluido frio associada. Estas características do escoamento tornam-se ainda mais nítidas conforme aumenta-se o número de Rayleigh, pois então tais correntes tornam-se mais estreitas.

Da mesma forma, a espessura das camadas-limite térmicas próximo às placas diminui com um aumento de Ra , resultado que concorda (ao menos qualitativamente) com a previsão de Shishkina et al. (2010). De tais camadas-limite destacam-se plumas, importantes responsáveis pela transferência de calor entre as placas (Celani et al., 2001). Por apresentarem temperatura próxima daquela de seu local de origem, isto ocorre através de um processo não-local e intermitente. Destaca-se que, de forma geral, o transporte não-local de propriedades em escoamentos turbulentos está associado à perda de acurácia do modelo da difusividade turbulenta apresentado na seção 3.5.1 (Pleim, 2007).

Por outro lado, conforme aumenta-se o número de Rayleigh, cresce a região do escoamento em que a temperatura é aproximadamente homogênea e igual à média das temperaturas das placas, $\Theta = \Theta_0 - \Delta\Theta/2$, o que pode ser percebido na figura 5.8 pelo progressivo aumento da predominância da cor verde com Ra . Destaca-se que a capacidade de homogeneizar as características de um escoamento, conhecida como *mixing*, é frequentemente reportada na literatura como uma das propriedades definidoras da turbulência (Lesieur, 2008, p. 2).

Também é possível observar tal homogeneização através dos perfis de temperatura ilustrados na figura 5.10. A situação típica, representada pela curva em verde, é um perfil essencialmente invariante em z^* , com exceção das regiões próximas às placas, em que formam-se camadas-limite térmicas em que os gradientes de temperatura são bastante elevados, de maneira a respeitar as condições de contorno impostas. De fato, a maior homogeneidade das propriedades do escoamento conforme aumenta-se o número de Rayleigh está associada à formação de estruturas (térmicas e camadas-limite, por exemplo) cada vez mais estreitas, uma vez que os gradientes tornam-se progressivamente mais localizados no espaço.

Também observa-se na figura 5.10 a variação da espessura das camadas-limite térmicas ao longo de x^* . A curva em azul mostra o perfil de temperatura de uma corrente fria descendente, que faz com que a camada-limite térmica seja mais estreita na placa inferior e mais espessa na placa superior. Analogamente, a curva em vermelho mostra o perfil de temperatura de uma corrente quente ascendente, que faz com que a camada-limite térmica seja mais estreita na placa superior e mais espessa na placa inferior.

Séries temporais típicas em regime turbulento estão ilustradas nas figuras 5.11 e 5.12, respectivamente para $Ra = 8 \times 10^4$ e $Ra = 1 \times 10^6$. A amplitude das flutuações de velocidade e temperatura aumenta com Ra , o que pode ser percebido através das escalas dos gráficos. Especialmente na figura 5.12 (em que Ra é maior), percebe-se que, enquanto U^* parece sempre oscilar (com amplitude variável) em torno de zero, há períodos relativamente longos em que W^* é predominantemente positivo e em que Θ'^* apresenta diversos picos também positivos. Tais períodos correspondem aos instantes em que uma corrente ascendente de fluido aquecido passou pela posição em que as séries foram obtidas ($x^* = \Gamma/2, z^* = 1/2$). Da mesma forma, há períodos em que W^* é predominantemente negativo e Θ'^* possui diversos picos negativos, que por sua vez correspondem aos instantes em que uma corrente descendente de fluido frio passou

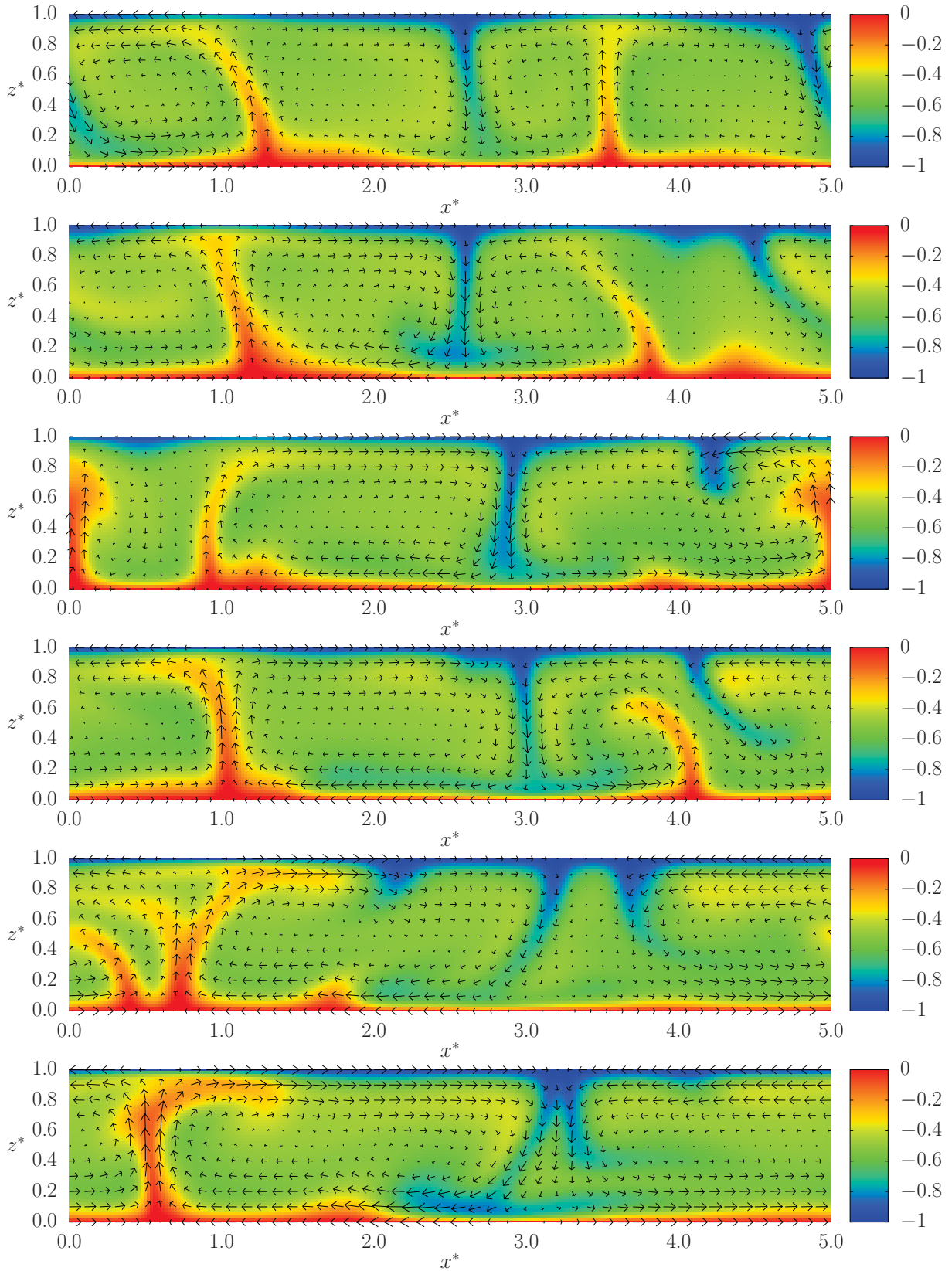


Figura 5.9: Cenas de um escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$, igualmente espaçadas entre os instantes $t^* = 13,07$ e $t^* = 13,27$, em que dois pares de células convectivas se colapsaram, dando origem a um único par. As cores representam a temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$, enquanto os vetores indicam o campo de velocidades.

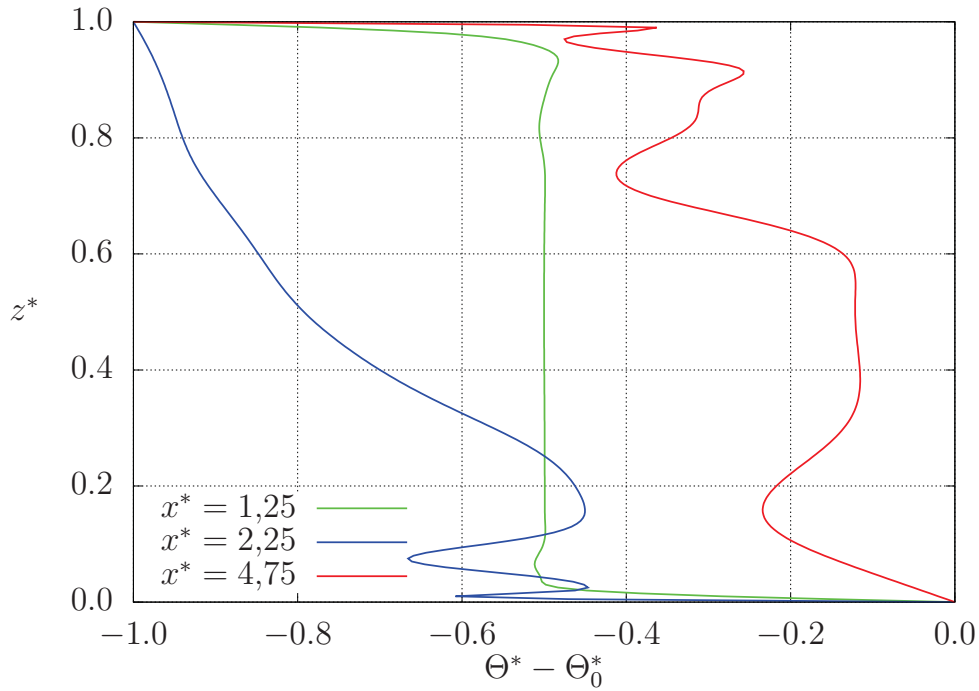


Figura 5.10: Perfis instantâneos de temperatura em diferentes posições x^* do escoamento com $Ra = 1 \times 10^7$ ilustrado na figura 5.8. A curva em verde representa o perfil típico que ocorre na maior parte do escoamento. A curva em azul corresponde aproximadamente à posição da corrente de subsidência, enquanto a curva em vermelho corresponde à posição da corrente ascendente. Também observa-se a variação da espessura das camadas-limite térmicas com x^* .

por tal posição. Assim, o fluxo de calor por advecção, dado pelo produto $W^*\Theta'^*$, é positivo na maior parte do tempo e bastante intermitente. Na realidade, pode-se imaginar que mesmo uma média em x^* de tal produto deve apresentar alguns picos devido às plumas que eventualmente se destacam das camadas-limite.

Finalmente, destaca-se que o período transiente (do ponto de vista estatístico) é bastante curto em regime turbulento. De fato, não é nem mesmo possível identificá-lo visualmente nas figuras 5.11 e 5.12. A figura 5.13 apresenta, através de imagens instantâneas do escoamento, a rápida evolução do sistema logo após a aplicação das perturbações iniciais: já no instante $t^* = 0,0017$, estão presentes diversas plumas. De acordo com [Chillà e Schumacher \(2012\)](#), é o agrupamento de tais estruturas que dá origem à circulação de larga escala observada durante os instantes posteriores.

Observações visuais de transições para novos regimes de escoamento tornam-se difíceis para números de Rayleigh elevados devido à complexidade do escoamento nestas condições. Além disso, apesar de [Busse \(1978\)](#) indicar que, para $Pr = 10$, o regime turbulento se inicia a partir de $Ra \approx 6,6 \times 10^4$, [Getling \(1998, p. 101\)](#) afirma que, na realidade, tal limite corresponde apenas à adição de harmônicos de maior frequência no escoamento, e que o regime turbulento ocorre de fato somente a partir de $Ra \approx 2,8 \times 10^5$ (para $Pr = 10$). Dentre as várias simulações realizadas no presente estudo, um escoamento oscilatório com espectro contendo vários picos discretos em frequências elevadas de fato ocorreu. Este foi o caso das duas (dentre 7) simulações com $Ra = 2 \times 10^5$ em que obteve-se $m = 2$. As séries temporais de tais realizações atípicas estão representadas na figura 5.14. Entretanto, em todos os outros casos testados em que $Ra > 6,6 \times 10^4$ (incluindo os casos em que $Ra < 2,8 \times 10^5$), as realizações se comportaram como escoamentos turbulentos, com espectros contínuos e com séries temporais similares àquelas das

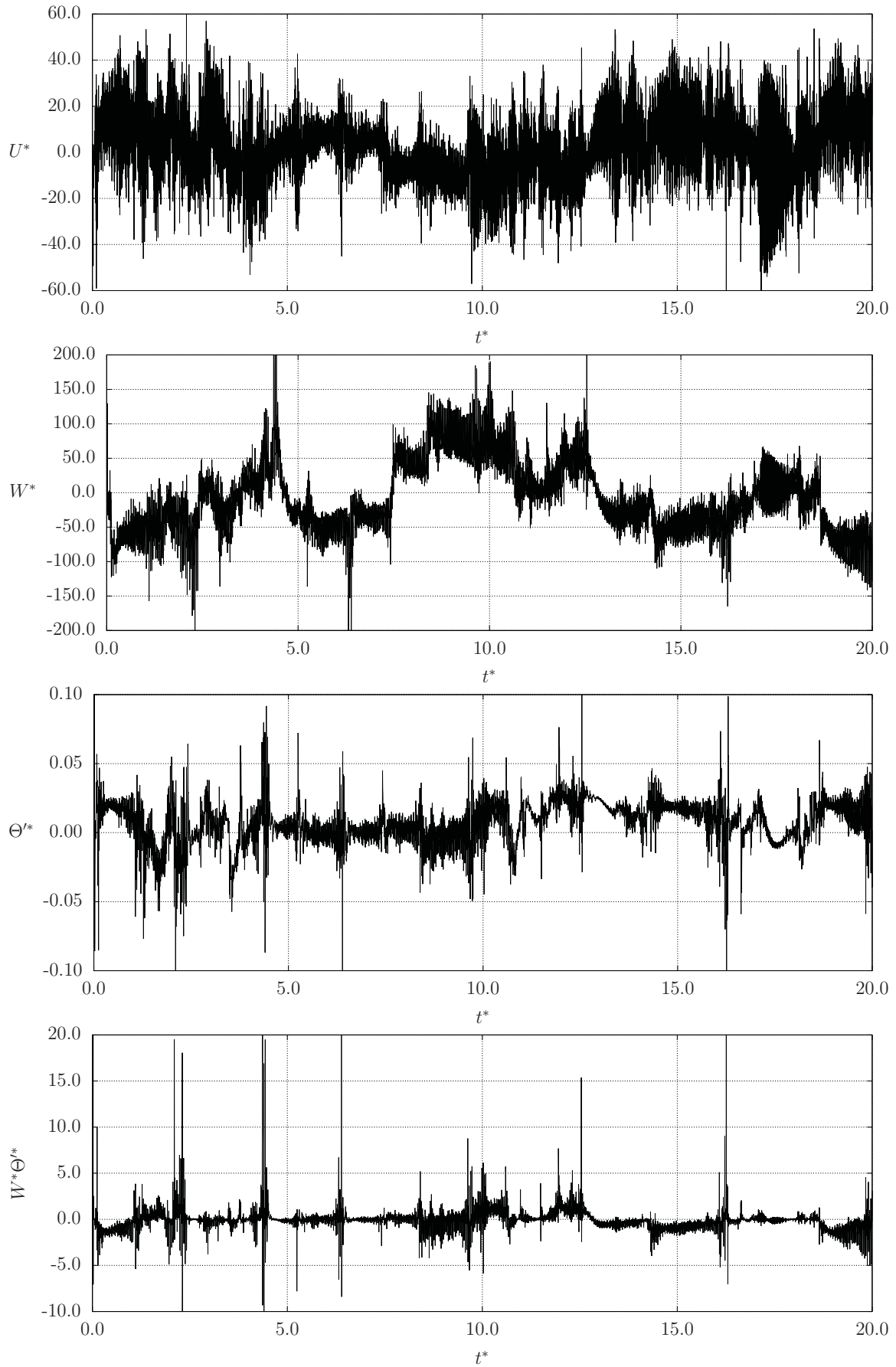


Figura 5.11: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 2$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime turbulento.

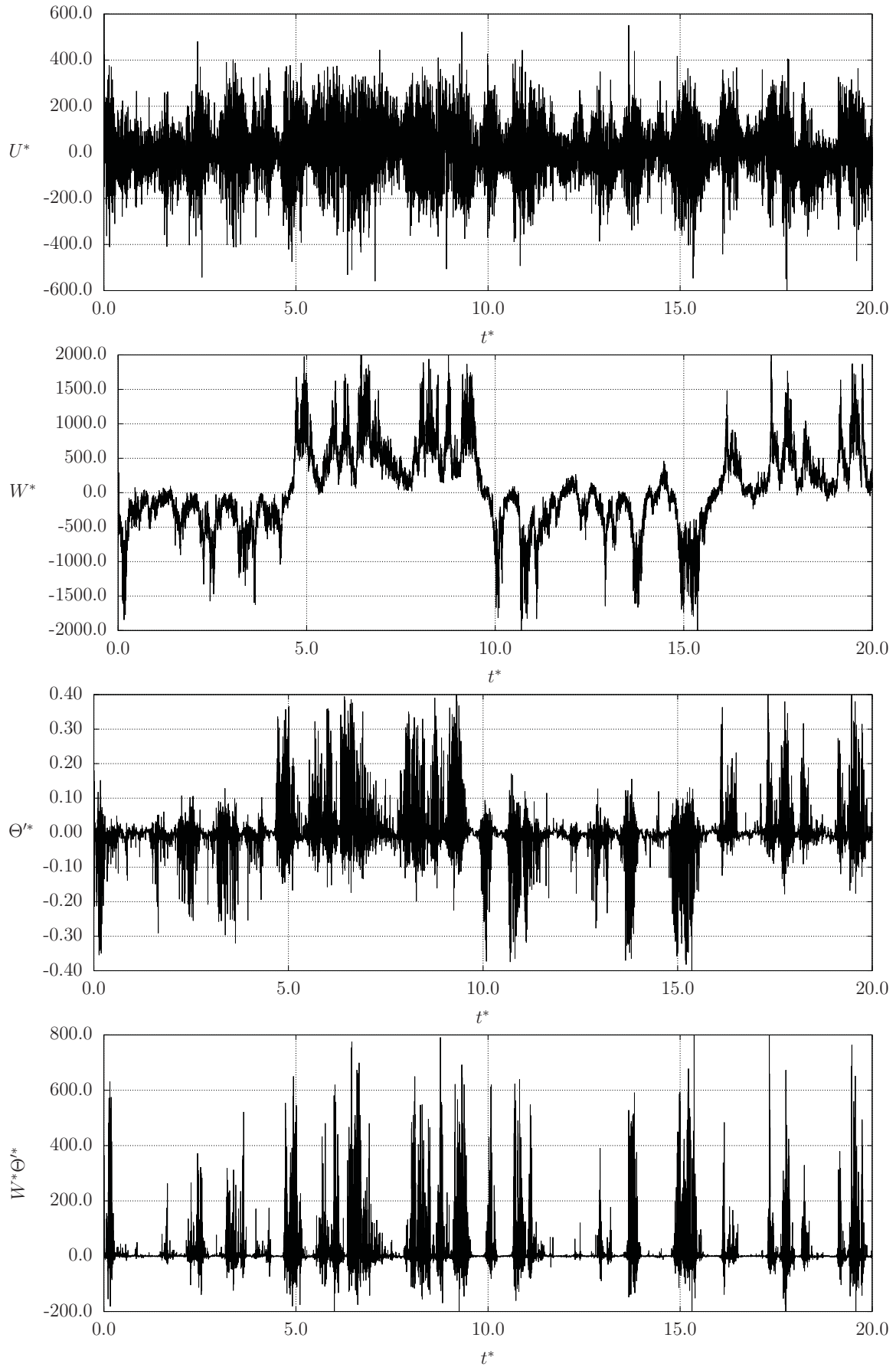


Figura 5.12: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 1 \times 10^6$ e $m = 1$, ilustrando o comportamento típico das variáveis em regime turbulento.

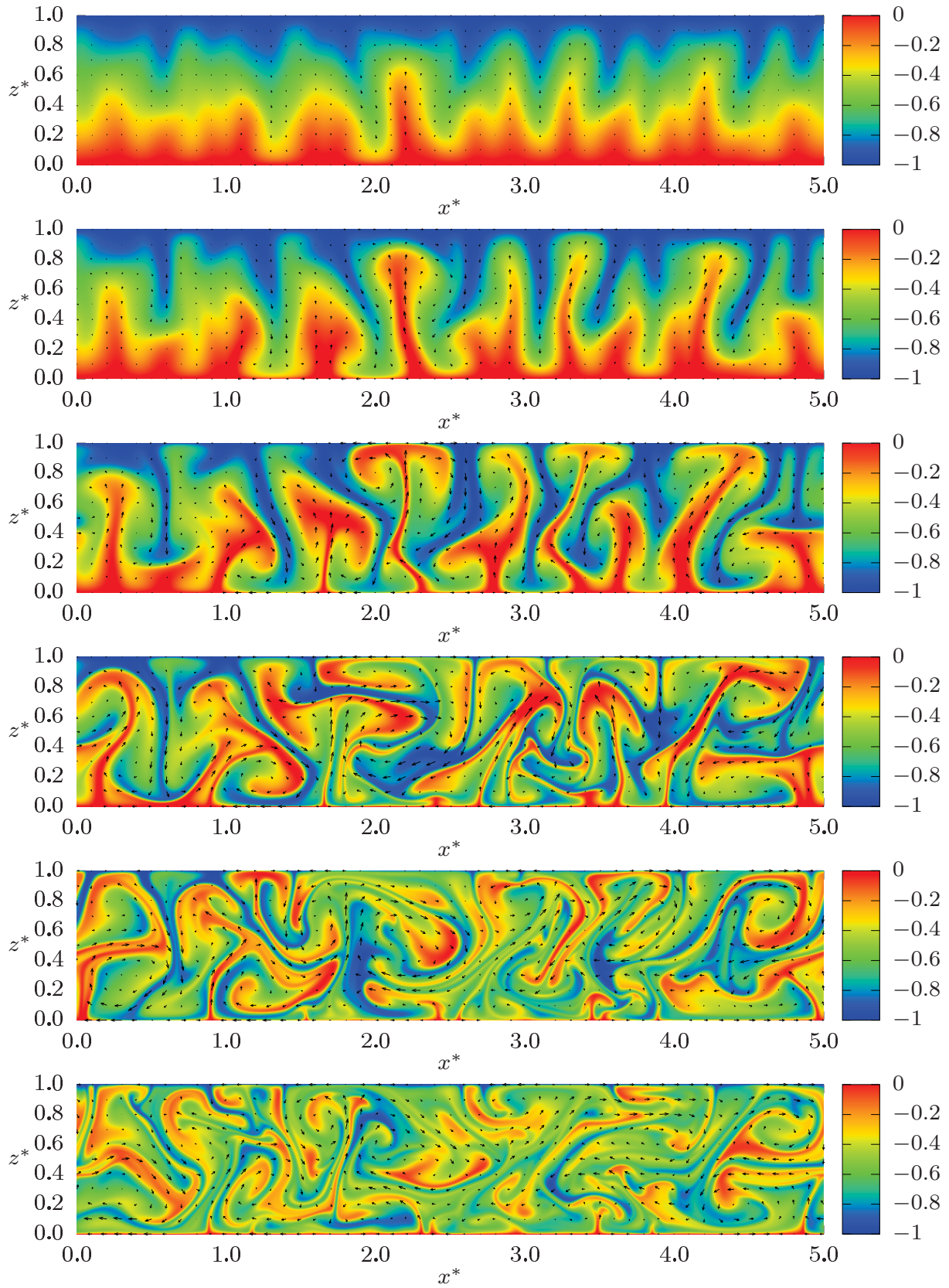


Figura 5.13: Cenas do período transiente de um escoamento com $Ra = 1 \times 10^7$, igualmente espaçadas entre os instantes $t^* = 0,0012$ e $t^* = 0,0017$. As cores representam a temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$, enquanto os vetores indicam o campo de velocidades.

figuras 5.11 e 5.12. Os espectros foram apresentados e discutidos na seção 5.3.1.

A figura 5.15 apresenta um resumo em que comparou-se os limites correspondentes aos diferentes regimes de escoamento previstos pelo diagrama de Busse (1978) aos resultados obtidos no presente estudo. Também foram incluídas as previsões calculadas via equações de Lorenz (1963). A diferença observada entre os valores de Ra correspondentes à instabilidade da solução estática deve-se unicamente às condições de contorno aplicadas sobre o campo de velocidades: condição de não-deslizamento, no caso do diagrama de Busse, e condição de tensão nula, nos casos restantes. No caso do DNS desenvolvido no presente estudo, os valores de Ra correspondentes à transição entre diferentes regimes não foram identificados exatamente, devido à limitação dos resultados aos valores de Ra efetivamente simulados. Finalmente, destaca-se que o valor de Ra previsto pelas equações de Lorenz correspondente à transição entre os regimes estacionário e caótico, obtido através das equações (3.48) e (3.61), depende do valor arbitrado de a , o número de onda horizontal. Os valores representados na figura 5.15 foram obtidos para $a = 2m/\Gamma$, com m igual a 1 e 2, que por sua vez correspondem às configurações do escoamento observadas nos resultados do DNS.

Finalmente, é importante destacar que, apesar do termo “regime turbulento” ser utilizado neste texto para se referir aos escoamentos obtidos via DNS no presente estudo, a bidimensionalidade do problema simulado faz com que tal expressão não seja, a rigor, adequada. Alguns fenômenos em turbulência, tais como o alongamento e a inclinação de vórtices (*vortex stretching/tilting*), são essencialmente tridimensionais. Todavia, os termos correspondentes a tais processos não estão presentes na equação da vorticidade bidimensional (Kundu et al., 2016, p. 215). Além disso, o problema tratado neste estudo não é um caso do que é em geral conhecido por turbulência bidimensional, que por sua vez ocorre em um plano normal à aceleração da gravidade (Davidson, 2004, p. 571).

Por outro lado, os escoamentos simulados numericamente neste estudo possuem as três propriedades definidoras da turbulência dadas por Lesieur (2008, p. 2). Primeiramente, o sistema é caótico, o que na prática causa sua imprevisibilidade, pois condições iniciais aleatórias ligeiramente diferentes entre si produzem realizações do escoamento completamente distintas. Além disso, o campo de temperatura tende a tornar-se homogêneo na maior parte do domínio, evidenciando a presença da propriedade conhecida como *mixing*. Por último, existe uma ampla faixa de escalas espaciais associadas ao escoamento, a qual varia desde as microescalas (apresentadas na seção 5.3.4), inclui a espessura das camadas-limite térmicas, e se estende até o tamanho dos maiores vórtices, cuja ordem de magnitude é aquela da distância entre as placas. Ademais, outras características tipicamente associadas à turbulência estão presentes, tais como valores elevados do número de Reynolds e vorticidade não-nula. Portanto, é neste sentido que o termo “escoamento turbulento” é utilizado neste texto.

5.2 Estatísticas globais

Neste estudo, adotou-se a hipótese ergódica, segundo a qual as médias temporais convergem para as médias probabilísticas (Bendat e Piersol, 2010, p. 142). Tal hipótese, por sua vez, pressupõe que o escoamento é estatisticamente estacionário, o que foi considerado razoável após uma análise visual de séries temporais de duração adimensional igual a 20. Destaca-se que a escala temporal de observação possui uma relação importante com a ideia de estacionariedade estatística. Por exemplo, observar W^* na figura 5.12 apenas entre os instantes $t^* \approx 8$ e $t^* \approx 12$ causa a impressão de que a média de tal processo varia ao longo do tempo. Da mesma forma, observar U^* na mesma figura durante um intervalo de tempo bastante inferior ao representado sugere que a sua variância apresenta comportamento não-estacionário.

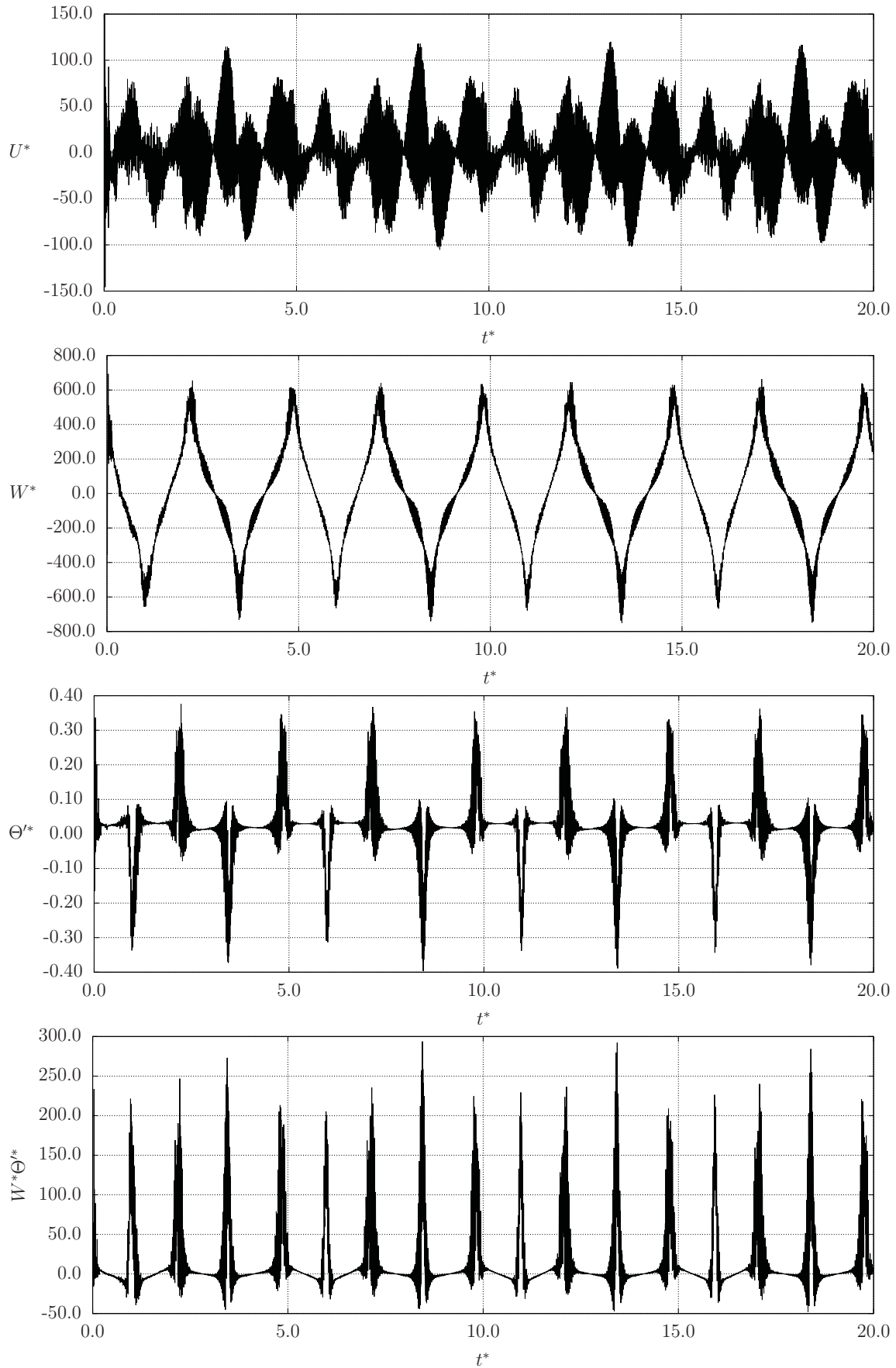
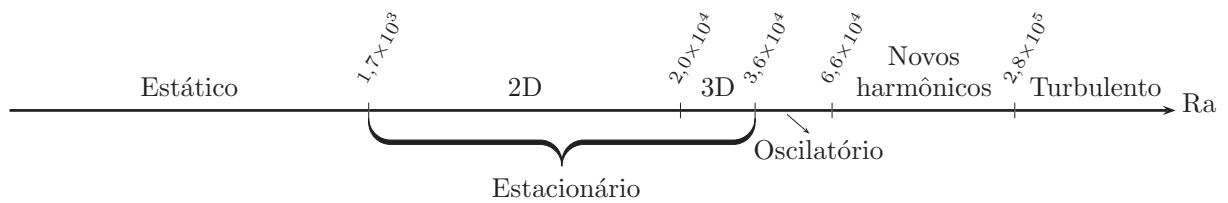
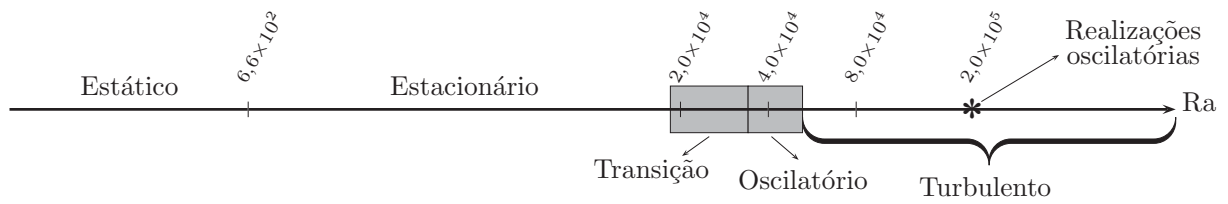


Figura 5.14: Séries temporais medidas em $x^* = \Gamma/2$, $z^* = 1/2$ em um escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 2$, ilustrando situação atípica em que a periodicidade se manifesta de uma maneira que não foi observada para os valores menores de Ra testados ou $m = 1$.

(a) Busse (1978)



(b) DNS



(c) Lorenz (1963)

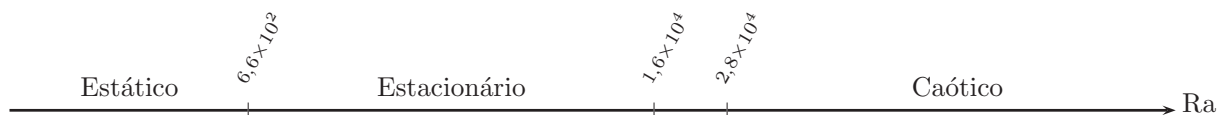


Figura 5.15: Resumo dos diferentes regimes de escoamento em função de Ra para $Pr = 10$ segundo (a) [Busse \(1978\)](#), (b) o DNS desenvolvido no presente trabalho, e (c) [Lorenz \(1963\)](#) (a escala do eixo horizontal é a mesma nos três casos).

Para fins práticos, contudo, supôs-se que todas as estatísticas do escoamento são únicas quando calculadas com base em intervalos de tempo suficientemente longos. Devido à limitação imposta pelo custo computacional do método, estabeleceu-se utilizar séries de duração adimensional igual a 20, que (por hipótese) é uma duração suficientemente longa para que as médias sejam representativas do processo. Os instantes que antecedem o período estatisticamente estacionário, nos quais as séries temporais ainda dependem fortemente das condições iniciais, foram identificados através de uma análise visual e removidos para que fosse realizado o cálculo de médias. Entretanto, em vários casos (sobretudo em regime turbulento), este período inicial apresentou duração desprezível, e as médias foram calculadas utilizando as séries temporais completas.

Através de tais médias, foi possível obter os números de Nusselt e de Reynolds, assim como as taxas de dissipação da energia cinética, para diferentes valores do número de Rayleigh.

5.2.1 Número de Nusselt

É possível simplificar a expressão de Nu_θ dada pela definição (3.36) aplicando-se a decomposição de Boussinesq, já que o estado de referência não depende de x ou de t . Aproximando $\varrho \approx \varrho_0$ (supondo que o efeito das variações de densidade sobre o fluxo de calor é desprezível), o numerador desta equação torna-se

$$\begin{aligned} \left\langle \varrho_0 c_p W \Theta - \varrho_0 c_p \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right\rangle_{x,t} &= \varrho_0 c_p \langle W \Theta \rangle_{x,t} - \varrho_0 c_p \alpha \frac{d\langle \Theta \rangle_{x,t}}{dz}, \\ &= \varrho_0 c_p \langle W \rangle_{x,t} \Theta_r + \varrho_0 c_p \langle W \Theta' \rangle_{x,t} - \varrho_0 c_p \alpha \frac{d\Theta_r}{dz} \\ &\quad - \varrho_0 c_p \alpha \frac{d\langle \Theta' \rangle_{x,t}}{dz}. \end{aligned}$$

Esta equação pode ser ainda mais simplificada para escoamentos incompressíveis (Ahlers et al., 2009). Isto pode ser demonstrado integrando a equação da continuidade (3.21) em todo domínio na direção x :

$$\int_0^L \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial W}{\partial z} \right) dx = 0 \quad \Rightarrow \quad U(L, z, t) - U(0, z, t) + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^L W(x, z, t) dx = 0,$$

em que trocou-se a ordem de derivação e integração de W supondo suavidade de tal função. Graças às condições de contorno periódicas, tem-se que $U(L, z, t) = U(0, z, t)$, de tal forma que os termos referentes à componente horizontal da velocidade se anulam. Dividindo a equação resultante por L para obter valores médios, tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial z} \langle W \rangle_x = 0.$$

Entretanto, como W é identicamente nulo sobre as placas devido às condições de contorno de impermeabilidade, $\langle W \rangle_x$ deve ser nulo em qualquer posição vertical do escoamento:

$$\langle W \rangle_x = 0, \quad \forall z \in [0, H], \quad t \in \mathbb{R}. \quad (5.1)$$

Este resultado analítico, que está implícito na expressão para Nu_θ de Ahlers et al. (2009) e foi explicitado no presente texto, também foi verificado numericamente.

Como (5.1) vale para qualquer instante de tempo, também tem-se que $\langle W \rangle_{x,t} = 0$. Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \left\langle \wp_0 c_p W \Theta - \wp_0 c_p \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right\rangle_{x,t} &= \wp_0 c_p \langle W \Theta' \rangle_{x,t} + \wp_0 c_p \alpha \Delta \Theta H^{-1} - \wp_0 c_p \alpha \frac{d \langle \Theta' \rangle_{x,t}}{dz}, \\ &= \wp_0 c_p \alpha \Delta \Theta H^{-1} \left(\langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t} + 1 - \frac{d \langle \Theta'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} \right), \end{aligned}$$

e da definição de Nu_θ dada por (3.36),

$$\text{Nu}_\theta = 1 - \frac{d \langle \Theta'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} + \langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t}. \quad (5.2)$$

A equação (5.2) foi utilizada para calcular Nu_θ na prática, pois o código DNS retorna diretamente as variáveis Θ'^* e W^* . Note que a escolha de H^2/α como escala de tempo faz com que a divisão de $W\Theta$ pelo fluxo de calor na situação estática forneça diretamente o fluxo adimensional $W^*\Theta^*$. O fluxo de calor turbulento pode ser obtido subtraindo-se o fluxo advectivo médio do fluxo advectivo total:

$$\langle w^* \theta^* \rangle = \langle W^* \Theta'^* \rangle - \langle W^* \rangle \langle \Theta'^* \rangle.$$

Segundo a hipótese ergódica, tais médias probabilísticas são iguais a médias temporais. Além disso, promediando os fluxos em x , tem-se

$$\langle w^* \theta^* \rangle_{x,t} = \langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t} - \langle \langle W^* \rangle_t \langle \Theta'^* \rangle_t \rangle_x.$$

Apesar de não ter sido feita nenhuma integração na direção vertical, o número de Nusselt é uniforme nesta direção. Isso foi verificado numericamente, como mostrado na figura 5.16, e também pode ser provado analiticamente, conforme mencionado por Shraiman e Siggia (1990). Para isto, basta utilizar a incompressibilidade (3.26) para reescrever a equação da conservação da energia (3.23) em sua forma adimensional como

$$\frac{\partial \Theta^*}{\partial t^*} + \frac{\partial (U^* \Theta^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial (W^* \Theta^*)}{\partial z^*} = \frac{\partial^2 \Theta^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Theta^*}{\partial z^{*2}}. \quad (5.3)$$

A média em x^* do segundo termo do lado esquerdo é

$$\frac{1}{\Gamma} \int_0^\Gamma \frac{\partial (U^* \Theta^*)}{\partial x^*} dx^* = \frac{1}{\Gamma} [(U^* \Theta^*)(x^* = \Gamma) - (U^* \Theta^*)(x^* = 0)],$$

o que é igual à zero devido às condições de contorno periódicas. Da mesma forma, a média em x^* do primeiro termo do lado direito de (5.3) se anula. Os termos restantes não possuem derivadas em relação a x^* , e portanto é possível trocar a ordem das operações de derivação e promediação para obter-se

$$\frac{\partial \langle \Theta^* \rangle_x}{\partial t^*} + \frac{\partial \langle W^* \Theta^* \rangle_x}{\partial z^*} = \frac{\partial^2 \langle \Theta^* \rangle_x}{\partial z^{*2}}.$$

A média temporal do primeiro termo pode ser calculada como

$$\left\langle \frac{\partial \langle \Theta^* \rangle_x}{\partial t^*} \right\rangle_t = \lim_{T^* \rightarrow \infty} \frac{1}{T^*} \int_0^{T^*} \frac{\partial \langle \Theta^* \rangle_x}{\partial t^*} dt^* = \lim_{T^* \rightarrow \infty} \frac{1}{T^*} [\langle \Theta^* \rangle_x(t^* = T^*) - \langle \Theta^* \rangle_x(t^* = 0)].$$

Entretanto, a temperatura é uma variável física que não deve crescer indefinidamente. Sendo assim, o termo entre colchetes é sempre um valor finito, e a média temporal do termo transiente

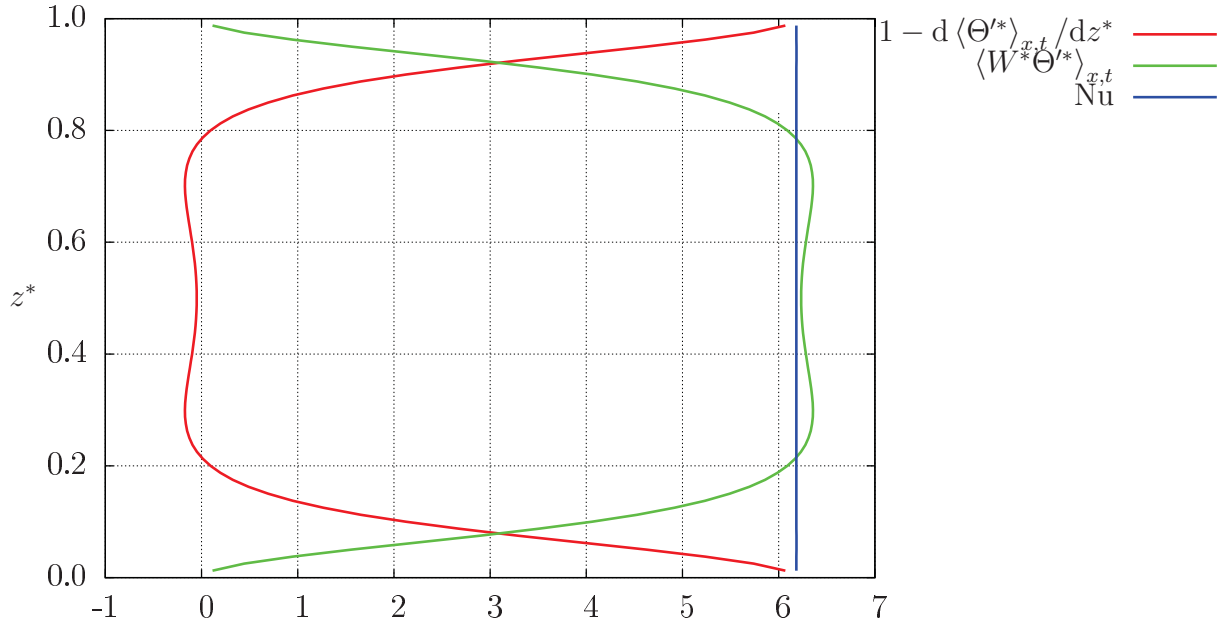


Figura 5.16: Fluxos de calor por condução (em vermelho), advecção total (média e turbulenta, em verde) e número de Nusselt em função da coordenada vertical (em azul) calculados numericamente para um escoamento com $Ra = 2 \times 10^4$ obtido via DNS.

também se anula. Tomando a média temporal dos termos restantes e trocando a ordem das operações de derivação e promediação, restam apenas derivadas na direção vertical. Reagrupando todos os termos restantes do lado esquerdo, encontra-se

$$\frac{d}{dz^*} \left(-\frac{d\langle\Theta^*\rangle_{x,t}}{dz^*} + \langle W^*\Theta^*\rangle_{x,t} \right) = \frac{dNu_\theta}{dz^*} = 0. \quad (5.4)$$

Os pontos no gráfico da figura 5.17a mostram os valores de Nu_θ obtidos via DNS através da equação (5.2) em função de Ra . Nu_θ é igual à unidade na situação estática, e aumenta conforme o número de Rayleigh cresce. Para $Ra \gtrsim 10^5$, por exemplo, o fluxo de calor total chega a ser mais de dez vezes o fluxo de calor que existiria somente devido à condução (estática) associada ao gradiente médio de temperatura $\Delta\Theta/H$, sendo que mesmo este valor de referência também aumenta com Ra .

Os valores de Nu_θ calculados numericamente via DNS foram comparados àqueles previstos teoricamente por Grossmann e Lohse (2000). Utilizou-se a estimativa

$$Nu_\theta \sim 0,33Ra^{1/4}Pr^{-1/12}, \quad (5.5)$$

válida para $Ra \lesssim 10^{11}$, $Pr \gtrsim 1$. A comparação entre tais valores foi apresentada de três formas diferentes nos gráficos da figura 5.17. Na figura 5.17a, por exemplo, nota-se que, para os valores de Ra simulados, a teoria GL subestima ligeiramente o fluxo de calor conforme obtido via DNS. Entretanto, através de uma análise visual da figura 5.17b, percebe-se que a razão entre a estimativa teórica e os correspondentes valores obtidos numericamente é aproximadamente constante para $2 \times 10^3 \lesssim Ra \lesssim 1 \times 10^6$. Os dados também estão representados num diagrama de dispersão na figura 5.17c.

Foi realizada uma regressão linear (não mostrada na figura) entre os logaritmos dos números de Nusselt e Rayleigh através do método dos mínimos quadrados (MMQ), e obteve-se

$$\log Nu_\theta = 0,345 \log Ra - 0,747 \quad \Rightarrow \quad Nu_\theta = 10^{-0,747} Ra^{0,345},$$

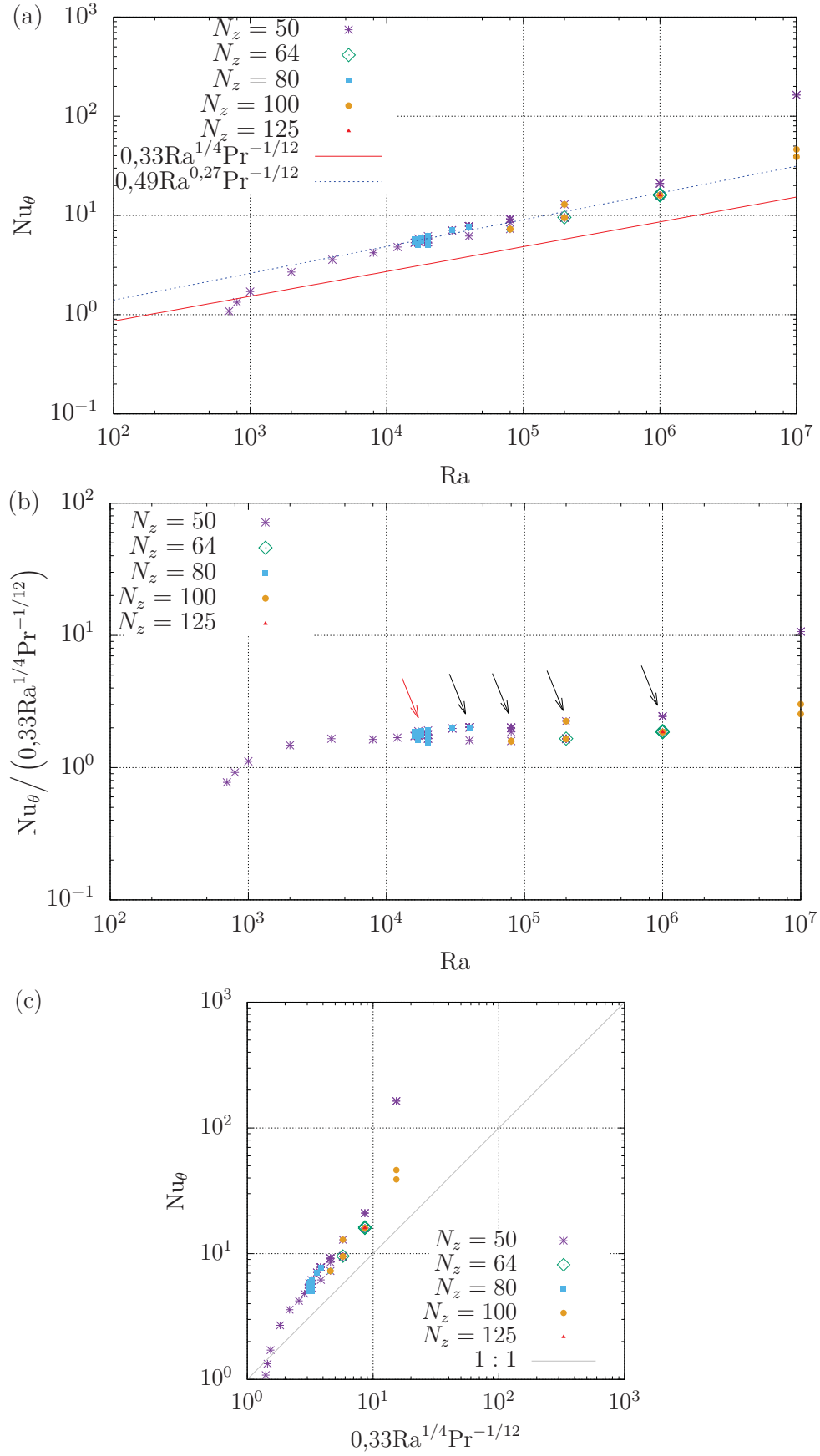


Figura 5.17: Valores de Nu_θ obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra , (b) em termos da razão entre eles em função de Ra , e (c) em um diagrama de dispersão.

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,888$. Por outro lado, considerando apenas o intervalo $2 \times 10^3 \leq Ra \leq 1 \times 10^6$, encontramos

$$\log Nu_\theta = 0,270 \log Ra - 0,396 \quad \Rightarrow \quad Nu_\theta = 10^{-0,396} Ra^{0,270},$$

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,947$. Neste caso, o expoente do número de Rayleigh se aproxima bastante do valor previsto pela teoria GL, igual a 0,25. Para encontrar uma lei de potência no formato de (5.5), basta forçar a constante que multiplica $Ra^{0,27}$ na equação acima a ser igual ao produto entre uma constante empírica e $Pr^{-1/12}$. Decidiu-se manter o expoente de Pr igual ao valor dado pela teoria GL pois, no presente estudo, tal parâmetro foi mantido constante. Para $Pr = 10$, tem-se

$$Nu_\theta \sim 0,49 Ra^{0,27} Pr^{-1/12}, \quad (5.6)$$

e tal ajuste está indicado pela linha tracejada na figura 5.17a. Assim, para reduzir o erro da estimativa de Nu_θ dada por (5.5) no intervalo $2 \times 10^3 \lesssim Ra \lesssim 1 \times 10^6$, deve-se utilizar valores ligeiramente maiores para a constante empírica e o expoente de Ra .

Contudo, destaca-se que as diferenças entre as equações (5.5) e (5.6) são relativamente pequenas. Dado que a teoria GL foi desenvolvida com base em experimentos, pode-se supor que tais diferenças devem-se à geometria, às condições de contorno e à bidimensionalidade do escoamento simulado no presente estudo. De fato, Schmalzl et al. (2004) verificaram que a teoria GL fornece uma boa previsão do número de Nusselt em simulações numéricas bidimensionais quando o número de Prandtl é maior que a unidade. Além disso, destaca-se que a qualidade da estimativa (5.5) deve variar para diferentes intervalos de Ra (inclusive para intervalos em que $Ra > 10^7$, não simulados neste trabalho).

Os pontos dos gráficos da figura 5.17 também foram identificados em função da espessura $h = N_z^{-1}$ da malha da simulação para a qual foram obtidos. De forma geral, todas as resoluções utilizadas retornaram valores de Nu_θ bastante próximos, exceto quando fez-se $N_z = 50$ e $Ra \gtrsim 10^6$. Em particular, para $Ra = 10^7$, a simulação com $N_z = 50$ ($\chi_\theta \approx 11,2$) retornou um valor de Nu_θ igual a cerca de 4 vezes aquele obtido com $N_z = 100$ ($\chi_\theta \approx 5,6$). Tais resultados estão de acordo com Grötzbach (1983) e Ahlers et al. (2009), segundo os quais uma resolução insuficiente do escoamento causa uma superestimativa do número de Nusselt.

Finalmente, destaca-se que diferentes condições iniciais produziram escoamentos com diferentes valores de Nu_θ , mesmo mantendo-se fixos o número de Rayleigh e a espessura da malha. Embora em regime estacionário tenha sido encontrado um único valor de Nu_θ para cada valor de Ra , para $Ra \gtrsim 10^4$ (regime oscilatório), diversos valores de Nu_θ (indicados pela seta vermelha na figura 5.17b) foram encontrados para o mesmo Ra . Isso também ocorreu para números de Rayleigh ainda maiores, já correspondentes ao regime turbulento. Neste caso, foram encontrados dois valores possíveis para Nu_θ (indicados pelas setas pretas na figura 5.17b), sendo de forma geral o valor maior associado a escoamentos com $m = 2$ pares de células convectivas, e o valor menor ocorrendo em escoamentos com $m = 1$.

Tal resultado questiona a existência de uma única função $Nu_\theta = Nu_\theta(Ra)$ bem definida, mesmo fixados os valores de Pr e Γ (assim como as condições de contorno). Ademais, este resultado sugere que, ao menos para os valores de Ra testados, o sistema apresenta um comportamento não-ergódico, dado que diferentes realizações do escoamento fornecem médias temporais distintas. Entretanto, em regime turbulento, uma vez fixado o valor de m , tais estatísticas (quando calculadas sobre um período de tempo suficientemente longo) parecem ser únicas. Além disso, parece-se que a variação de Nu_θ observada para número de Rayleigh fixo diminui conforme aumenta-se Ra , reduzindo a importância de tal incerteza em problemas de engenharia, em que tem-se tipicamente valores de Ra mais elevados do que aqueles simulados numericamente no presente estudo.

5.2.2 Número de Reynolds

Existem diversas escalas de velocidade que podem ser utilizadas para definir o número de Reynolds (baseadas na velocidade das plumas, na amplitude das flutuações, etc.), as quais fornecem valores de Re que podem até mesmo apresentar dependências distintas com relação aos números de Rayleigh e Prandtl (Ahlers et al., 2009). No presente estudo, definiu-se a macroescala de velocidade adimensional \mathcal{U}^* como a média do módulo do vetor velocidade em todo o domínio e no tempo, ou seja,

$$\mathcal{U}^* \equiv \left\langle \sqrt{U^{*2} + W^{*2}} \right\rangle_{x,z,t}. \quad (5.7)$$

Assim, de acordo com a equação (3.35), o número de Reynolds pode ser calculado como $Re = \mathcal{U}^*/Pr$.

Os pontos da figura 5.18a representam os valores de Re obtidos via DNS para escoamentos com diferentes números de Rayleigh. Os mesmos são comparados com a estimativa teórica (indicada pela reta) dada pela equação (3.34). Tal equação foi obtida com base na hipótese de que a principal aceleração do escoamento é o empuxo, e foi utilizada para estimar as microescalas turbulentas e, portanto, definir a espessura da malha numérica em termos de Ra e Pr .

Para a faixa de valores de Ra simulados, tal previsão teórica superestima o número de Reynolds, como também pode ser visto na figura 5.18b através da razão entre os valores observados e teóricos. Dado que as microescalas de Kolmogorov são menores quanto maior o número de Reynolds (ver equação (3.82)), a equação (3.83) subestima os valores de η_u^* e τ_u^* . Consequentemente, a espessura da malha de uma simulação direta de RBC pode ser maior do que o previsto inicialmente, como foi de fato verificado numericamente. Por outro lado, também percebe-se que a estimativa teórica torna-se progressivamente melhor conforme aumenta-se Ra . Os dados também estão representados num diagrama de dispersão na figura 5.18c.

Foi realizada uma regressão linear (não mostrada na figura) entre os logaritmos dos números de Reynolds e Rayleigh via MMQ, e obteve-se

$$\log Re = 0,701 \log Ra - 2,246 \quad \Rightarrow \quad Nu_\theta = 10^{-2,246} Ra^{0,701},$$

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,986$. Por outro lado, considerando apenas o intervalo $2 \times 10^3 \leq Ra \leq 1 \times 10^6$, encontramos

$$\log Re = 0,670 \log Ra - 2,091 \quad \Rightarrow \quad Re = 10^{-2,091} Ra^{0,670},$$

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,992$. Neste caso, o expoente do número de Rayleigh se aproxima um pouco mais do valor previsto teoricamente. Forçando a constante que multiplica $Ra^{0,67}$ na equação acima a ser igual ao produto entre uma constante empírica e $Pr^{-1/2}$ (decidiu-se manter o expoente de Pr igual ao valor previsto teoricamente pois, no presente estudo, tal parâmetro foi mantido constante), para $Pr = 10$, tem-se

$$Re \sim 0,026 Ra^{0,67} Pr^{-1/2}, \quad (5.8)$$

ajuste indicado pela reta tracejada na figura 5.18a. Assim, para reduzir o erro da estimativa de Re dada por (3.34) no intervalo $2 \times 10^3 \lesssim Ra \lesssim 1 \times 10^6$, deve-se utilizar um valor maior para o expoente de Ra , e multiplicar o resultado por uma constante empírica que reduz em duas ordens de grandeza o resultado.

No regime de Kraichnan (para Ra elevado e valores intermediários de Pr), a teoria GL fornece a estimativa

$$Re \sim 0,036 Ra^{1/2} Pr^{-1/2},$$

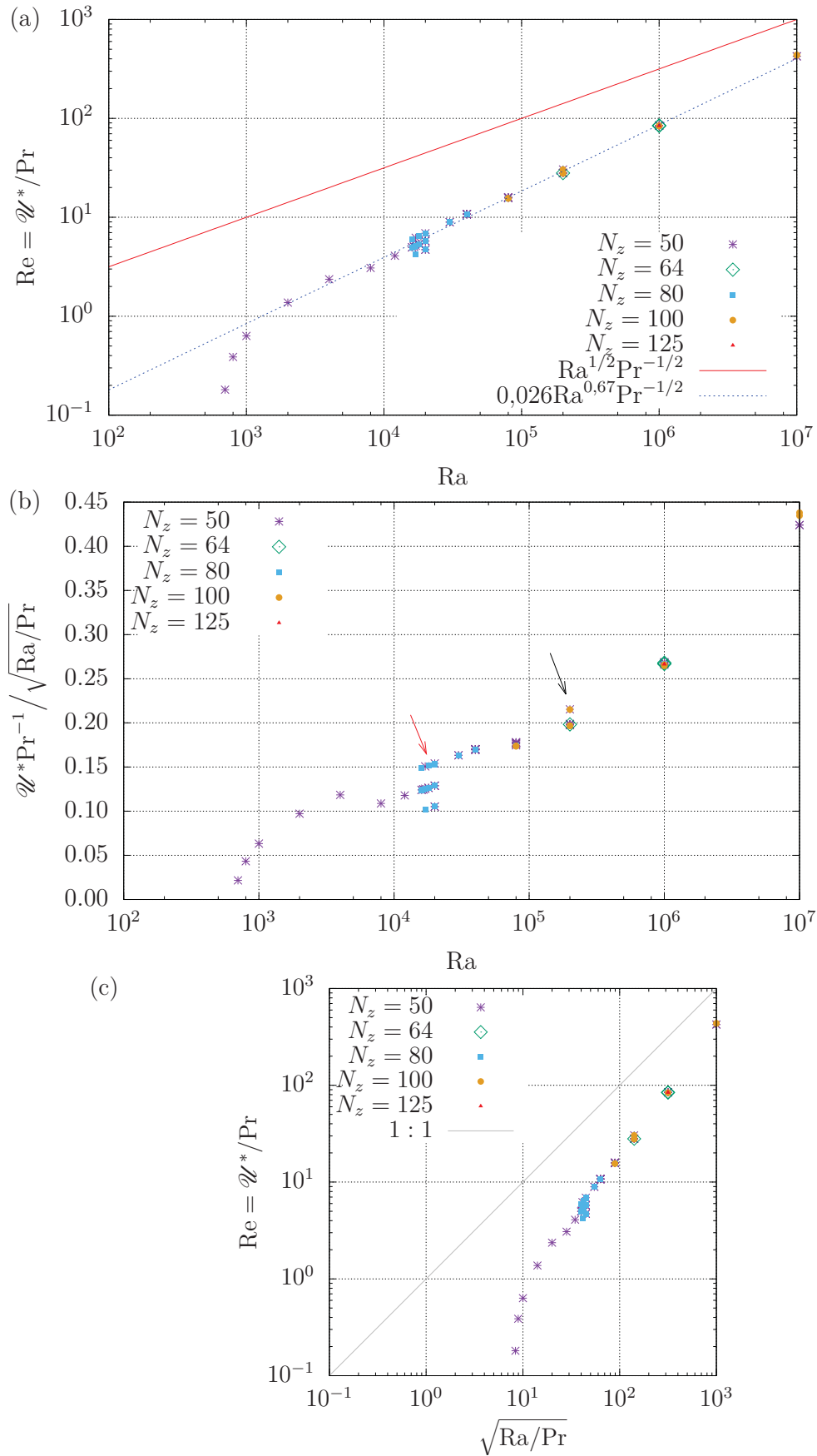


Figura 5.18: Valores de Re obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra , (b) em termos da razão entre eles em função de Ra , e (c) em um diagrama de dispersão.

que difere de (3.34) apenas pelo fator numérico experimental. Já no regime em que vale a estimativa (5.5) de Nu_θ utilizada neste texto, a teoria GL indica que

$$Re \sim 0,039Ra^{1/2}Pr^{-5/6}$$

(Grossmann e Lohse, 2000). Novamente, destaca-se que a lei de potência (5.8), obtida no presente texto para um escoamento bidimensional, deve diferir dos resultados da teoria GL devido ao fato desta última basear-se em experimentos. Além disso, Grossmann e Lohse (2000) utilizam a velocidade nas proximidades das bordas das células convectivas para definir Re , e não um valor médio em todo o domínio como feito no presente estudo, o que também pode alterar as leis de potência.

A espessura da malha pareceu ter pouca influência sobre os valores calculados de Re nos testes realizados. Na figura 5.18b, nota-se apenas que a malha com $N_z = 50$ subestima Re ligeiramente para $Ra = 10^7$. Também é possível verificar o comportamento não-ergódico do sistema através dos diferentes valores de Re obtidos variando-se apenas as condições iniciais aplicadas ao escoamento. Este efeito, bastante pronunciado em regime oscilatório ($Ra \approx 2 \times 10^4$, indicado pela seta vermelha na figura 5.18b), parece diminuir conforme aumenta-se Ra . Em regime turbulento, os valores maiores de Re (note, por exemplo, o par de valores indicados pela seta preta na figura 5.18b) estão associados à configuração em que $m = 2$.

5.2.3 Taxa de dissipação da energia cinética

A taxa de dissipação total (média e flutuação turbulenta) da energia cinética do escoamento é dada por $\tau_{ij}S_{ij}/\wp$ (ver equação (3.9)). Usando a equação constitutiva (3.7) para fluidos newtonianos, e aceitando a validade da aproximação de Boussinesq sob a forma da equação (3.21), pode-se escrever

$$\frac{1}{\wp_0}\tau_{ij}S_{ij} = 2\nu S_{ij}S_{ij} = \frac{\nu}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) = \nu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right).$$

Expandindo as somas para escoamentos bidimensionais no plano xz , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{\wp_0}\tau_{ij}S_{ij} &= \nu \left[2 \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 + 2 \frac{\partial U}{\partial z} \frac{\partial W}{\partial x} \right] \\ &= \nu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 \right\} \\ &= \nu \left[-4 \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial z} + \left(\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

em que na última igualdade utilizou-se a equação da continuidade. Em termos de variáveis adimensionais,

$$\frac{1}{\wp_0}\tau_{ij}S_{ij} = \frac{\nu\alpha^2}{H^4} \left[-4 \frac{\partial U^*}{\partial x^*} \frac{\partial W^*}{\partial z^*} + \left(\frac{\partial U^*}{\partial z^*} + \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right)^2 \right].$$

Entretanto, o fator de adimensionalização da taxa de dissipação (consequência direta dos fatores de adimensionalização da velocidade e do comprimento) é igual a α^3/H^4 . Assim, a taxa de dissipação adimensional depende também do número de Prandtl,

$$\left(\frac{1}{\wp_0}\tau_{ij}S_{ij} \right)^* = Pr \left[-4 \frac{\partial U^*}{\partial x^*} \frac{\partial W^*}{\partial z^*} + \left(\frac{\partial U^*}{\partial z^*} + \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right)^2 \right].$$

Utilizando novamente a equação da continuidade, é possível escrever ainda

$$\left(\frac{1}{\rho_0}\tau_{ij}S_{ij}\right)^* = \Pr \left[4 \left(\frac{\partial U^*}{\partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^*}{\partial z^*} + \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right)^2 \right], \quad (5.9)$$

confirmando que $\tau_{ij}S_{ij}$ é uma quantidade sempre positiva.

Em regime turbulento, separando a taxa de dissipação da energia cinética do escoamento médio da TKE (ambas definidas na equação (3.71)), temos

$$\begin{aligned} \epsilon_M^* &= 2\Pr \langle S_{ij}^* \rangle \langle S_{ij}^* \rangle = \Pr \left[4 \left\langle \left(\frac{\partial U^*}{\partial x^*} \right)^2 \right\rangle + \left(\left\langle \frac{\partial U^*}{\partial z^*} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right\rangle \right)^2 \right], \\ \varepsilon^* &= 2\Pr \langle s_{ij}^* s_{ij}^* \rangle = \Pr \left[4 \left\langle \left(\frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial u^*}{\partial z^*} + \frac{\partial w^*}{\partial x^*} \right)^2 \right\rangle \right]. \end{aligned}$$

Numericamente, os valores esperados são calculados como médias temporais, e portanto tal operação pode permutar com as derivadas espaciais. Entretanto, o custo computacional da determinação de ϵ_M^* e ε^* é reduzido quando calcula-se as derivadas antes das médias. Além disso, também é eficaz definir a variável auxiliar

$$\Xi^* \equiv \frac{\partial U^*}{\partial z^*} + \frac{\partial W^*}{\partial x^*} = \underbrace{\left\langle \frac{\partial U^*}{\partial z^*} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial W^*}{\partial x^*} \right\rangle}_{\langle \Xi^* \rangle} + \underbrace{\frac{\partial u^*}{\partial z^*} + \frac{\partial w^*}{\partial x^*}}_{\xi^*}, \quad (5.10)$$

em termos da qual as taxas de dissipação podem ser escritas como

$$\epsilon_M^* = \Pr \left[4 \left\langle \left(\frac{\partial U^*}{\partial x^*} \right)^2 \right\rangle + \langle \Xi^* \rangle^2 \right], \quad (5.11)$$

$$\varepsilon^* = \Pr \left[4 \left\langle \left(\frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right)^2 \right\rangle + \langle \xi^{*2} \rangle \right]. \quad (5.12)$$

O cálculo numérico das taxas de dissipação foi realizado aproximando-se as derivadas da velocidade por diferenças finitas através da equação (4.7). Para a obtenção de seus valores nas posições $z^* = h$ e $z^* = (N_z - 1)h$, foi necessário obter U^* nos pontos-fantasma $z^* = -h$ e $z^* = (N_z + 1)h$. Para isso, considerou-se a expansão em série de Taylor de uma função $f(z^*)$ em torno de $z^* = 0$ avaliada no ponto $z^* = kh$, denotada como $f_k = f(z^* = kh)$, dada por

$$f_k = f_0 + kh \frac{df}{dz^*} \Big|_{z^*=0} + \frac{(kh)^2}{2} \frac{d^2f}{dz^{*2}} \Big|_{z^*=0} + \frac{(kh)^3}{6} \frac{d^3f}{dz^{*3}} \Big|_{z^*=0} + \frac{(kh)^4}{24} \frac{d^4f}{dz^{*4}} \Big|_{z^*=0} + \mathcal{O}(h^5).$$

Para obter uma expressão para f_{-1} apenas em termos dos valores de f (e não de suas derivadas) em outros pontos, combinou-se linearmente tais expansões para $k = -1, 1, 2, 3$ e 4 , e procurou-se os valores dos coeficientes que anulassem os termos de ordem inferior a h^5 . Em outras palavras, buscou-se os valores de c_1, c_2, c_3 e c_4 tais que

$$f_{-1} + c_1 f_1 + c_2 f_2 + c_3 f_3 + c_4 f_4 = (1 + c_1 + c_2 + c_3 + c_4) f_0 + \mathcal{O}(h^5).$$

Tais coeficientes são aqueles que resolvem o sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \\ 1 & 8 & 27 & 64 \\ 1 & 16 & 81 & 256 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

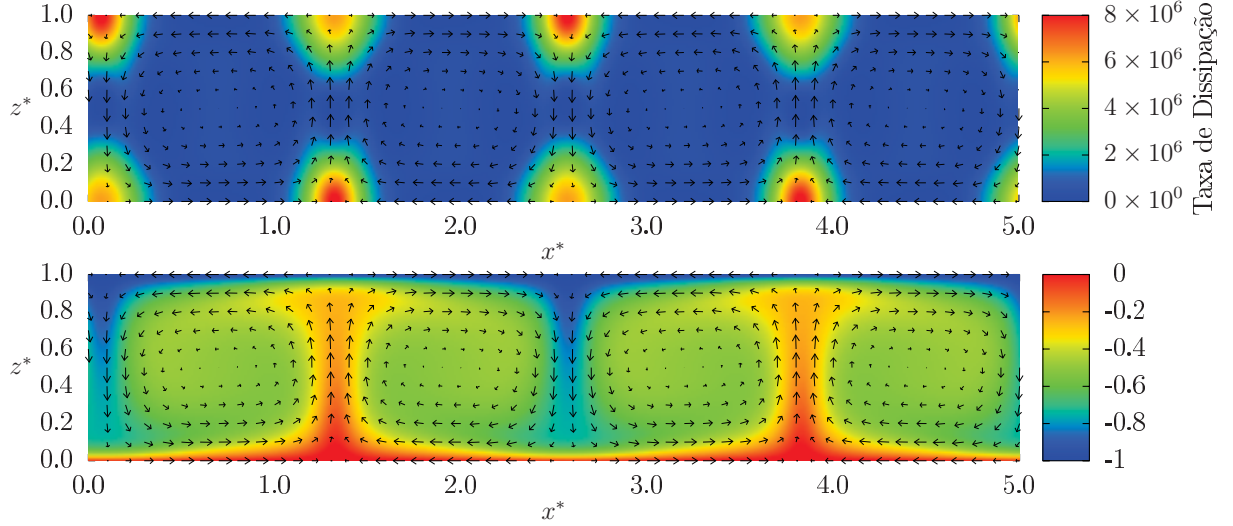


Figura 5.19: Campos instantâneos da taxa de dissipação total da energia cinética ($\epsilon_M^* + \epsilon^*$, acima) e de temperatura adimensional ($\Theta^* - \Theta_0^*$, abaixo) de um escoamento com $Ra = 2 \times 10^4$.

de onde encontra-se

$$f_{-1} = 5f_0 - 10f_1 + 10f_2 - 5f_3 + f_4.$$

Analogamente, para os pontos-fantasma sobre a placa superior, tem-se

$$f_{N_z+1} = 5f_{N_z} - 10f_{N_z-1} + 10f_{N_z-2} - 5f_{N_z-3} + f_{N_z-4}.$$

Para o cálculo numérico das taxas de dissipação sobre as placas, aplica-se a condição de contorno de tensão nula, que anula $\partial U^*/\partial z^*$. Para o cálculo das derivadas em relação a x^* , aplica-se as condições de contorno periódicas.

A figura 5.19 ilustra a distribuição espacial da taxa de dissipação da energia cinética de um escoamento com $Ra = 2 \times 10^4$ (em que ainda não há turbulência). Nota-se que tal distribuição é bastante desigual: enquanto, na maior parte do domínio, a taxa de dissipação é desprezível, há regiões bastante localizadas no espaço que são responsáveis por praticamente toda a dissipação. Tais regiões ocorrem próximo às placas e nos locais de encontro das células convectivas, onde formam-se gradientes de velocidade importantes e, portanto, há considerável deformação de elementos de fluido. É possível que, em regime turbulento, a taxa de dissipação aproxime-se de uma condição estatisticamente homogênea na direção x^* , conforme os centros de ascensão e subsidência vão se deslocando horizontalmente ao longo do tempo.

A fim de verificar a estimativa dada pela equação (3.81), os valores de $\epsilon_M^* + \epsilon^*$ promediados em todo o domínio x^*z^* foram comparados com \mathcal{U}^{*3} (supondo $\epsilon_M^* \ll \epsilon^*$). Das figuras 5.20b e 5.20c, nota-se que \mathcal{U}^{*3} subestima a taxa de dissipação para $Ra \lesssim 10^5$, e superestima tal quantidade para $Ra \gtrsim 10^5$. Os pontos de tais gráficos foram baseados na escala de velocidade obtida numericamente. Alternativamente, é possível utilizar-se a estimativa teórica $\mathcal{U}^* \sim \sqrt{RaPr}$, a qual decorre da equação (3.34), que por sua vez superestima a macroescala de velocidade. O resultado é a previsão

$$\epsilon_M^* + \epsilon^* \sim (RaPr)^{3/2}, \quad (5.13)$$

que também superestima a taxa de dissipação para todos os valores de Ra testados (ver figura 5.20a).

Destaca-se que (5.13) supõe a validade das equações (3.81) e (3.34), que na realidade são ambas superestimativas da taxa de dissipação e do número de Reynolds, respectivamente. Estas equações também foram utilizadas para obter-se as estimativas das microescalas de Kolmogorov

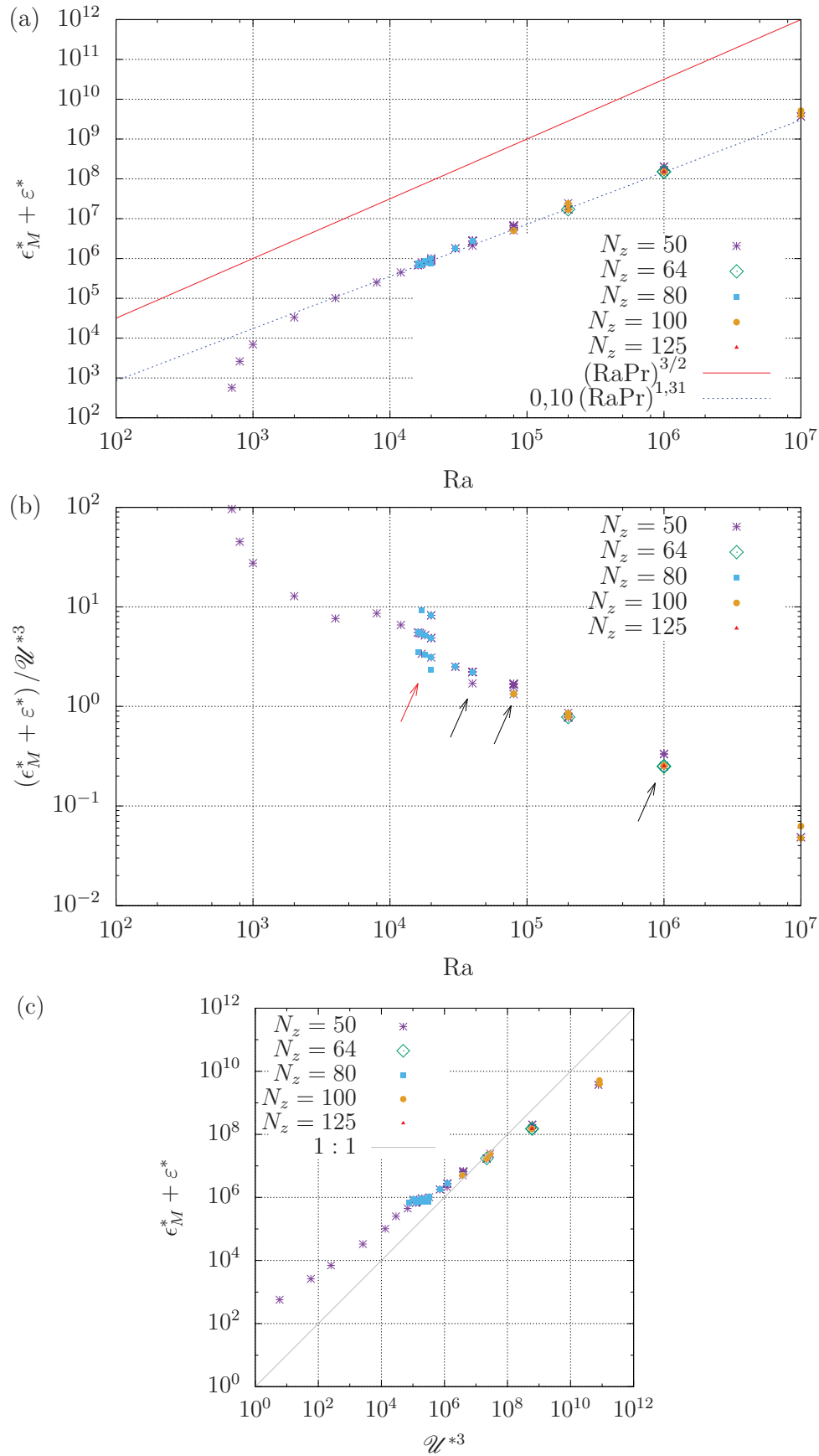


Figura 5.20: Valores de $\epsilon_M^* + \epsilon^*$ obtidos numericamente via DNS e previstos pela teoria GL representados (a) separadamente em função de Ra, (b) em termos da razão entre eles em função de Ra, e (c) em um diagrama de dispersão. Para o cálculo dos valores teóricos, utilizou-se $\mathcal{U}^* \sim \sqrt{RaPr}$ na figura (a), mas os valores obtidos numericamente nas figuras (b) e (c).

dadas pela equação (3.83), nas quais este estudo se baseou para definir a espessura h da grade numérica. De fato, escrevendo as microescalas de Kolmogorov dadas pela equação (3.80) na forma adimensional, encontra-se

$$\eta_u^* \sim \left(\frac{\text{Pr}^3}{\epsilon^*} \right)^{1/4}, \quad \tau_u^* \sim \sqrt{\frac{\text{Pr}}{\epsilon^*}}. \quad (5.14)$$

Basta substituir a expressão (5.13) para ϵ^* (supondo $\epsilon_M^* \ll \epsilon^*$) na equação acima para recuperar as estimativas das microescalas dadas por (3.83) utilizadas neste estudo.

Conclui-se que a equação (3.83) subestima as microescalas de Kolmogorov dadas pela equação (3.80). Tal resultado, discutido também na seção 5.3.4, reduz o custo computacional da simulação direta de RBC, e está de acordo com o fato de que os valores calculados de Nu_θ , Re e $\epsilon_M^* + \epsilon^*$ se mostraram, em geral, pouco sensíveis à espessura da malha utilizada. Por outro lado, é importante destacar que (5.13), e portanto (3.83), referem-se a valores médios em x^*z^* . A taxa de dissipação da energia cinética, e consequentemente as microescalas turbulentas, variam consideravelmente no espaço, de maneira que existem regiões do escoamento que necessitam de uma resolução melhor do que outras. Contudo, para o caso ilustrado na figura 5.19 para $\text{Ra} = 2 \times 10^4$, por exemplo, a taxa de dissipação adimensional atinge valores máximos da ordem de 8×10^6 , enquanto sua média é, de acordo com a figura 5.20a, aproximadamente igual a 1×10^6 . A previsão teórica dada por (5.13), por sua vez, fornece a estimativa 1×10^8 , um valor bastante superior até mesmo do máximo observado em todo o domínio.

Foi realizada uma regressão linear (não mostrada nas figuras) entre os logaritmos de $\epsilon_M^* + \epsilon^*$ e do número de Rayleigh via MMQ, e obteve-se

$$\log(\epsilon_M^* + \epsilon^*) = 1,393 \log \text{Ra} - 0,072 \quad \Rightarrow \quad \epsilon_M^* + \epsilon^* = 10^{-0,072} \text{Ra}^{1,393},$$

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,984$. Por outro lado, considerando apenas o intervalo $2 \times 10^3 \leq \text{Ra} \leq 1 \times 10^6$, encontramos

$$\log(\epsilon_M^* + \epsilon^*) = 1,313 \log \text{Ra} + 0,331 \quad \Rightarrow \quad \epsilon_M^* + \epsilon^* = 10^{0,331} \text{Ra}^{1,313},$$

com um coeficiente de determinação igual a $\mathcal{R}^2 = 0,996$. Supondo que, assim como sugere a equação (5.13), a taxa de dissipação depende do produto RaPr elevado a uma única potência, para $\text{Pr} = 10$, tem-se

$$\epsilon_M^* + \epsilon^* \sim 0,10 (\text{RaPr})^{1,31}, \quad (5.15)$$

ajuste indicado pela reta tracejada na figura 5.20a. Assim, para reduzir o erro da estimativa da taxa de dissipação dada por (5.13) no intervalo $2 \times 10^3 \lesssim \text{Ra} \lesssim 1 \times 10^6$, deve-se utilizar um valor menor para o expoente de RaPr , e multiplicar o resultado por uma constante empírica que reduz em uma ordem de grandeza o resultado. Supondo $\epsilon_M^* \ll \epsilon^*$, é possível utilizar a equação (5.15) para obter uma estimativa mais acurada das microescalas através de (5.14).

Alternativamente à equação (3.82), que depende do número de Reynolds, é possível estimar as microescalas através do número de Nusselt. Para isso, utiliza-se a relação exata (para condições de contorno de não-deslizamento sobre as placas) dada por Shraiman e Siggia (1990):

$$\left\langle \nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right\rangle_{x,z,t} = \frac{\nu^3}{H^4} (\text{Nu}_\theta - 1) \text{RaPr}^{-2}.$$

A quantidade do lado esquerdo desta equação é conhecida como “pseudo-dissipação”, e é aproximadamente igual a ϵ (Pope, 2000). Dividindo ambos os lados desta equação por α^3/H^4 , encontra-se

$$\epsilon^* \sim (\text{Nu}_\theta - 1) \text{RaPr}. \quad (5.16)$$

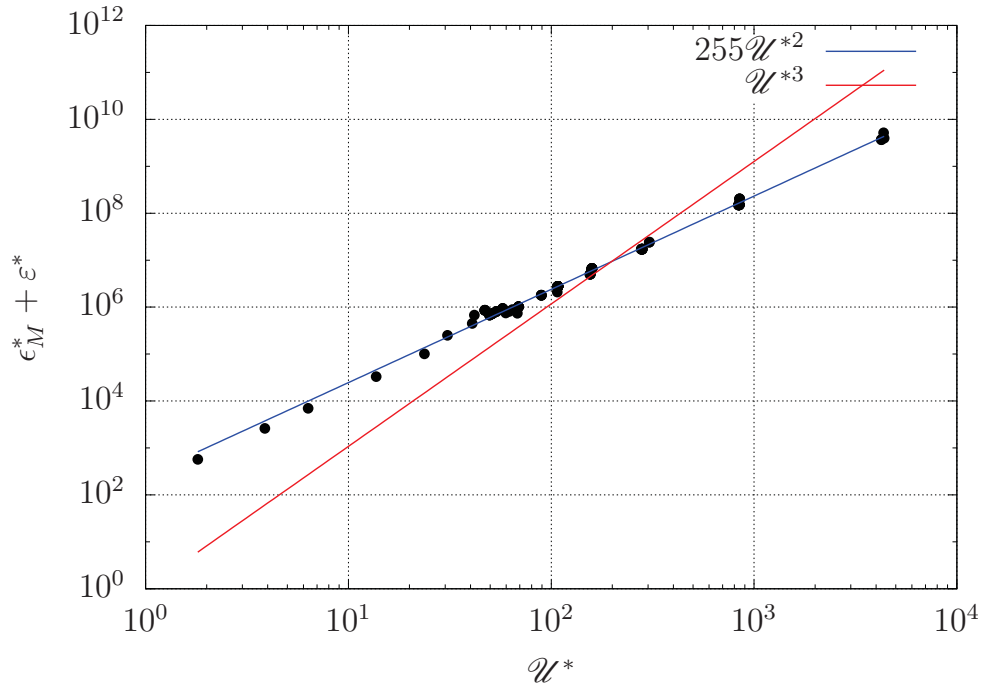


Figura 5.21: Taxa de dissipação da energia cinética ajustada em função da macroescala de velocidade via MMQ. Para a reta em vermelho, $\mathcal{R}^2 = 0,996$. Para a reta em azul, em que forçou-se o coeficiente que multiplica a potência de \mathcal{U}^* a ser igual à unidade, $\mathcal{R}^2 = 0,991$.

Verificou-se que (5.16) fornece uma estimativa excelente da taxa de dissipação mesmo para os dados obtidos no presente estudo, em que adotou-se condições de contorno de tensão nula sobre as placas. Para obter as microescalas em função apenas de Ra e Pr , é necessário adotar uma estimativa para Nu_θ , e então utilizar (5.16) em conjunto com (5.14). Tal análise não foi realizada no presente estudo.

Visto que os gráficos da figura 5.20 sugeriram que $\varepsilon^* \sim \mathcal{U}^{*3}$ (ou sua forma dimensional, dada pela equação (3.81)), um resultado bem conhecido em mecânica dos fluidos, não é uma aproximação excelente em RBC, verificou-se empiricamente qual seria a relação de escala mais adequada para os dados obtidos numericamente. Para isso, foram ajustadas (via MMQ) duas retas para $\log(\epsilon_M^* + \varepsilon^*)$ e $\log \mathcal{U}^*$ (ilustradas na figura 5.21). Primeiramente, permitiu-se que os coeficientes angular e linear de tal relação variassem, e obteve-se

$$\epsilon_M^* + \varepsilon^* \sim 255,0 \mathcal{U}^{*1,986}, \quad \mathcal{R}^2 = 0,996.$$

No segundo caso, fixou-se o coeficiente linear em zero (de forma que o coeficiente que multiplica a potência de \mathcal{U}^* na equação não linearizada fosse igual à unidade), e obteve-se

$$\epsilon_M^* + \varepsilon^* \sim \mathcal{U}^{*3,034}, \quad \mathcal{R}^2 = 0,991,$$

um resultado bastante próximo da previsão teórica (3.81), e com um coeficiente de determinação elevado. Novamente, destaca-se que tais leis de potência podem depender da escala de velocidade adotada.

Assim como ocorreu com os números de Nusselt e Reynolds, os valores calculados de $\epsilon_M^* + \varepsilon^*$ se mostraram pouco afetados pela espessura da grade numérica utilizada (para os valores testados de N_z e Ra). Além disso, foram obtidos diferentes valores para a taxa de dissipação da energia cinética para Ra fixo, seja em regime oscilatório (como indicado pela seta vermelha na figura 5.20b) ou em regime turbulento (conforme indicado pelas setas pretas na mesma

figura). Este resultado indica que RBC apresenta comportamento não-ergódico pois, em algum sentido, o escoamento mantém uma memória de suas condições iniciais que o impede de visitar diferentes estados possíveis, associados a diferentes condições iniciais. Consequentemente, médias temporais obtidas a partir de uma única realização não convergem para as médias de *ensemble*, obtidas a partir de diferentes realizações do escoamento.

Contudo, nota-se nas figuras 5.17, 5.18 e 5.20 que as diferenças entre as médias obtidas separadamente para cada realização são muito menores do que os valores das próprias médias. Além disso, tais diferenças tendem a diminuir conforme aumenta-se Ra e, em regime turbulento, há apenas dois valores (bastante próximos) possíveis de cada estatística para dado Ra , sendo cada um deles em geral associado a uma configuração do escoamento ($m = 1$ ou $m = 2$). Portanto, o efeito (já pequeno, no caso das estatísticas discutidas nesta seção) da não-ergodicidade pode ser reduzido (ou até mesmo eliminado, possivelmente) separando-se os resultados de acordo com a configuração do escoamento.

5.3 Outras medidas

5.3.1 Espectros

Considerando que a DFT, definida em (4.19), está relacionada à transformada de Fourier, definida em (3.89), através de

$$\hat{v}_k = \Delta t [\text{DFT}(v)]_k,$$

a expressão (3.95) para o cálculo de um espectro pode ser adaptada para uma série de dados de duração $\mathcal{T} = N\Delta t$ como

$$G_{\theta q} \left(n_k = \frac{k}{N\Delta t} \right) = \frac{2\Delta t}{N} [\text{DFT}(\theta)]_k^* [\text{DFT}(q)]_k, \quad k = 0, \dots, N/2.$$

O resultado é uma estimativa do espectro conhecida como periodograma. Entretanto, a variância do periodograma não diminui conforme aumenta-se a duração da série utilizada (Dias, 2017). Alternativamente, utiliza-se o método de Bartlett, o qual divide a série em m blocos de duração $M = N/m$, calcula o periodograma de cada bloco individualmente e, em seguida, toma a média dos resultados para cada frequência.

Foram obtidos os periodogramas e os espectros de frequência (via método de Bartlett) das séries temporais das variáveis do escoamento avaliadas no ponto central do domínio $(x^*, z^*) = (\Gamma/2, 1/2)$. Os espectros unilaterais (definidos em (3.90)) G_{uu} , G_{ww} e $G_{\theta\theta}$, e o coespectro (definido em (3.91)) $\text{Co}_{w\theta}$ estão apresentados nas figuras de 5.22 a 5.27 para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento. O espectro de quadratura $\text{Qu}_{w\theta}$ não foi discutido pois, segundo (3.92), o mesmo não afeta o fluxo turbulento de calor $\langle w\theta \rangle$. Séries de duração adimensional igual a 20 foram utilizadas para a determinação dos periodogramas (curvas em cinza nas figuras) via (3.95). Para reduzir a variância dos resultados através do método de Bartlett (discutido, por exemplo, por Dias (2017), e indicado pelas curvas em preto nas figuras), as mesmas séries também foram divididas em 20 blocos de duração individual unitária.

Algumas frequências importantes foram destacadas nas figuras. As retas verticais em vermelho indicam as frequências associadas às microescalas de tempo da velocidade (linha contínua) e da temperatura (linha tracejada), ambas calculadas numericamente (através de (5.14) e (3.85)) a partir das séries temporais avaliadas no ponto central do escoamento, sendo portanto os valores “verdadeiros” de τ_u^* e τ_θ^* . As retas verticais em verde indicam as mesmas frequências conforme previsto teoricamente pela equação (3.83). Dado que tal equação subestima as

microescalas da turbulência, as frequências correspondentes são maiores que os valores de fato calculados.

A frequência de “amostragem” de cada sinal é igual ao inverso do passo de tempo da simulação, e os espectros são calculados numericamente até a frequência de Nyquist, igual à metade da frequência de amostragem, $(2\Delta t)^{-1}$ (Bendat e Piersol, 2010, p. 331). Em todos os casos apresentados nas figuras de 5.22 a 5.27, a frequência de Nyquist foi superior a τ_u^{*-1} e τ_θ^{*-1} , e foi maior até mesmo que a superestimativa teórica de tais frequências (com exceção da estimativa de τ_θ^{*-1} , dada por $(RaPr)^{3/4}$, para $Ra = 1 \times 10^6$). Tal evidência confirma que as simulações diretas de fato resolveram as microescalas de tempo. Contudo, não há garantia de que as microescalas espaciais foram resolvidas. Como uma primeira aproximação, o espectro de frequências temporais pode ser relacionado ao espectro de números de onda (no espaço) através da hipótese da turbulência congelada de Taylor (Pope, 2000, p. 223). Entretanto, tal hipótese supõe que a velocidade média do escoamento é muito maior que a sua variância, o que não é válido no nosso caso (ver, por exemplo, a figura 5.12).

De forma geral, os espectros associados ao regime turbulento possuem picos em frequências baixas e intermediárias, e então decaem rapidamente (na região correspondente à faixa de dissipação) conforme aumenta-se a frequência até $n \approx \tau_u^{*-1}$ ou $n \approx \tau_\theta^{*-1}$, onde o comportamento dos mesmos muda abruptamente. Tal resultado está de acordo com o fato reportado na literatura de que grande parte da dissipação da TKE ocorre em escalas superiores às microescalas turbulentas (Moser e Moin, 1987; Yeung e Pope, 1989; Pope, 2000, p. 237; Davidson, 2004, p. 406).

No caso dos espectros envolvendo a temperatura, $G_{\theta\theta}$ e $Co_{w\theta}$, a faixa de dissipação se estende até frequências um pouco mais elevadas, conforme esperado para $Pr > 1$. Além disso, diferentemente do que ocorre quando o número de Rayleigh é baixo, para $Ra = 1 \times 10^6$ (figura 5.27), por exemplo, o escoamento é suficientemente turbulento para que o comportamento do espectro na faixa viscosa convectiva (em que $\tau_u^{*-1} < n < \tau_\theta^{*-1}$) seja diferente do seu comportamento em frequências tais que $n > \tau_\theta^{*-1}$, em que praticamente toda a TKE já foi dissipada. Para números de Rayleigh ainda mais elevados (não simulados no presente estudo), é possível que tal separação entre escalas se torne mais evidente, de maneira similar aos espectros teóricos ilustrados na figura 3.4.

Para $n \gtrsim \tau_u^{*-1}$ e $n \gtrsim \tau_\theta^{*-1}$, ou seja, após a faixa de dissipação, os espectros passam a decair com inclinação aproximadamente constante (com exceção de um pequeno efeito de *aliasing*, que faz com que os espectros atinjam a frequência de Nyquist quase horizontalmente) e com uma variância bastante reduzida (exceto pelos periodogramas para frequências bastante próximas à frequência de Nyquist). A mudança abrupta do comportamento dos espectros após a faixa de dissipação torna evidente que tais frequências elevadas correspondem a um fenômeno diferente daquele que ocorre em frequências mais baixas. Como hipótese, sugere-se que tal fenômeno corresponde ao escoamento laminar que ocorre em escalas inferiores às microescalas turbulentas. Por outro lado, é possível que se trate de um efeito puramente numérico.

Alternativamente, conjecturou-se que tal faixa estivesse associada à amostragem excessiva das séries temporais, um procedimento conhecido como *oversampling*. Para verificar tal hipótese, determinou-se a frequência média com que uma partícula de fluido percorre uma distância igual à espessura da malha numérica, dada por \mathcal{U}^*/h , sendo os valores de \mathcal{U}^* determinados numericamente através de (5.7). Em algum sentido, tal frequência corresponde àquela com a qual a informação contida no sinal é atualizada. Entretanto, verificou-se que \mathcal{U}^*/h sempre supera τ_θ^{*-1} , e em geral é até mesmo maior que a frequência de Nyquist, de forma que a faixa final dos espectros, em que o decaimento é aproximadamente constante, já ocorre para $n \ll \mathcal{U}^*/h$. Por esta razão, tal hipótese foi rejeitada.

Nas figuras correspondentes a escoamentos turbulentos, ocorre uma separação entre os periodogramas e os espectros determinados via método de Bartlett apenas nas altas frequências: para $n \gtrsim \tau_\theta^{*-1}$, os espectros de Bartlett passam a superar (em geral) os periodogramas. Não foi determinada a razão de tal separação, mas sugere-se que a mesma ocorra devido ao fato das altas frequências conterem um efeito de ruído numérico importante, e representarem pouco a física do escoamento. Possivelmente, tal ruído é um processo estocástico não-estacionário, de tal forma que as médias calculadas ao aplicar-se o método de Bartlett não convergem para o periodograma, sendo portanto uma estimativa enviesada do valor esperado deste último. Todavia, destaca-se que a escala logarítmica promove um efeito visual que acentua a diferença entre as curvas, que na realidade é tipicamente um milhão de vezes inferior aos valores dos picos dos espectros. Desta forma, verificou-se, por exemplo, que a integração numérica dos periodogramas e dos espectros de Bartlett retornam os mesmos valores.

Por outro lado, os espectros correspondentes ao regime oscilatório, apresentados nas figuras 5.22 e 5.25, apresentam comportamento bastante distinto dos demais, contendo diversos picos discretos em dadas frequências. Para $Ra = 4 \times 10^4$ (figura 5.22), por exemplo, o maior pico ocorre na frequência fundamental $n = 88$, e os picos seguintes parecem ocorrer em múltiplos inteiros deste valor ($n = 176, 264, 352$). De acordo com Bendat e Piersol (2010, p. 6), uma série temporal é periódica quando seu espectro possui picos discretos em dadas frequências, de maneira que todas as possíveis razões entre as mesmas sejam números racionais. Caso alguma destas razões seja um número irracional, a série é dita quase-periódica. Os espectros em discussão foram obtidos numericamente, de forma que os mesmos são conhecidos apenas para determinados valores de n . Consequentemente, não é possível determinar as frequências exatas em que ocorrem os picos a fim de se verificar se o escoamento é de fato periódico.

Destaca-se que, para $Ra = 8 \times 10^4$, na configuração $m = 2$ desenvolveu-se um escoamento turbulento com espectros contínuos (figura 5.23), ainda que com picos mais pronunciados que os espectros na configuração $m = 1$ para o mesmo número de Rayleigh. Interessantemente, para $Ra = 2 \times 10^5$, por outro lado, na configuração $m = 2$ desenvolveu-se um escoamento oscilatório (cujas séries temporais estão ilustradas na figura 5.14) com espectros discretos (figura 5.25). Neste caso, verifica-se um número maior de picos do que no caso $Ra = 4 \times 10^4$, os mesmos ocorrendo nas frequências $n = 329, 656, 984, 1312, 1640, 1969, 2301, \dots$, valores próximos dos múltiplos inteiros de 328. Tais resultados estão de acordo com Getling (1998), segundo o qual adiciona-se mais harmônicos (discretos) ao escoamento conforme aumenta-se Ra até aproximadamente $2,8 \times 10^5$ (para $Pr = 10$), e com Busse (1978), segundo o qual um espectro contínuo, correspondente a um escoamento não-periódico, substitui os espectros discretos quando o número de Rayleigh é suficientemente elevado.

Em uma próxima etapa do presente estudo, deve-se determinar as inclinações dos espectros em diferentes faixas de frequência. Resultados preliminares sugeriram que, após a região de dissipação, os mesmos decrescem segundo aproximadamente $G \sim n^{-2}$ para os casos testados (em média). O valor deste expoente pode ser consequência do método numérico utilizado, ou estar associado ao escoamento laminar que ocorre em escalas inferiores às microescalas da turbulência. As leis de potência obtidas devem ser comparadas aos resultados reportados na literatura para turbulência bidimensional, contendo escalares, e em RBC, discutidos por exemplo por Kraichnan (1967); Paul et al. (2009); Lohse e Xia (2010); Verma et al. (2011), e ilustrados na figura 3.4.

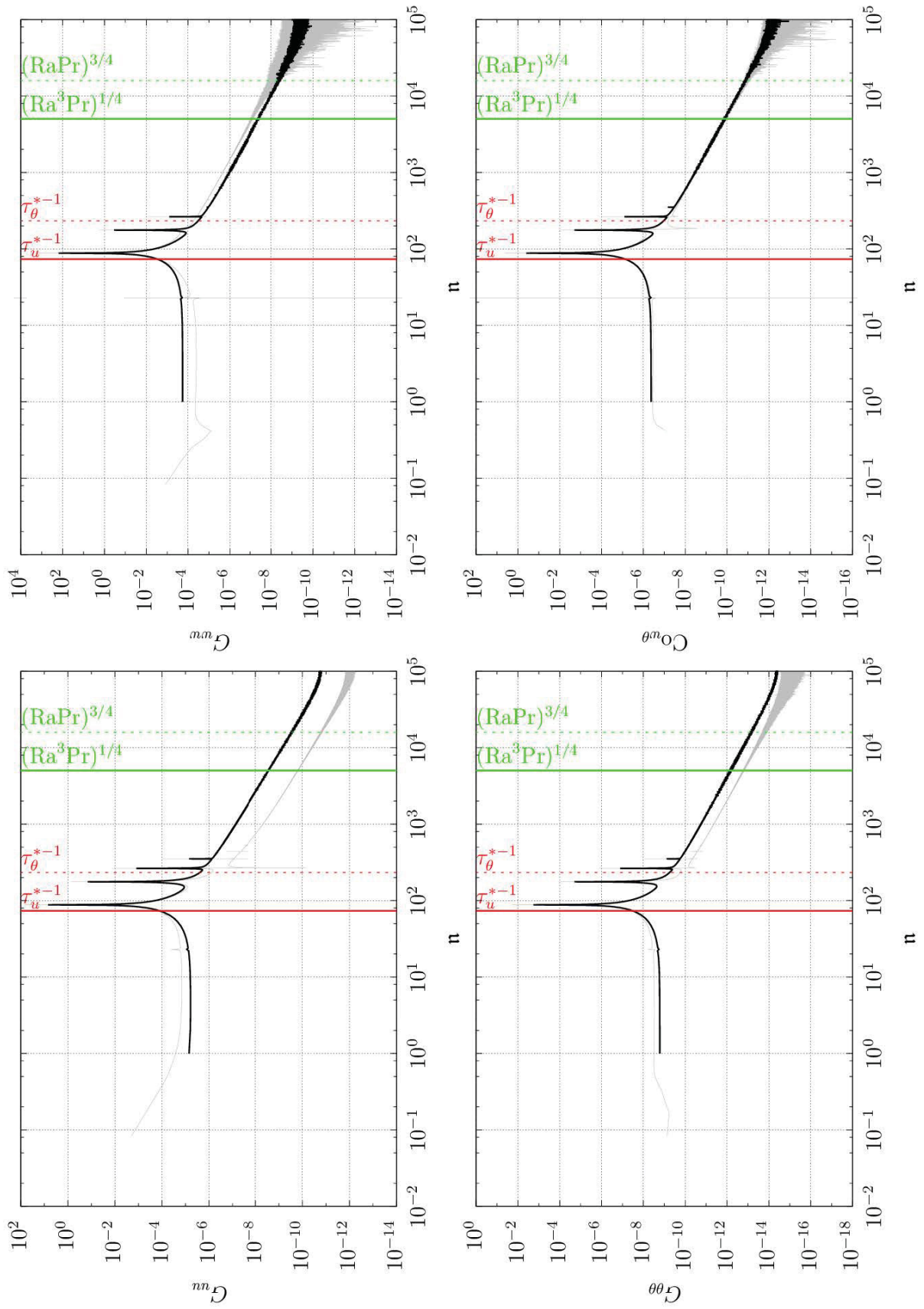


Figura 5.22: Autoespectros de U^* , W^* e $\Theta^{/*}$, e coespectro de W^* e $\Theta^{/*}$, típicos em escoamento com $Ra = 4 \times 10^4$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

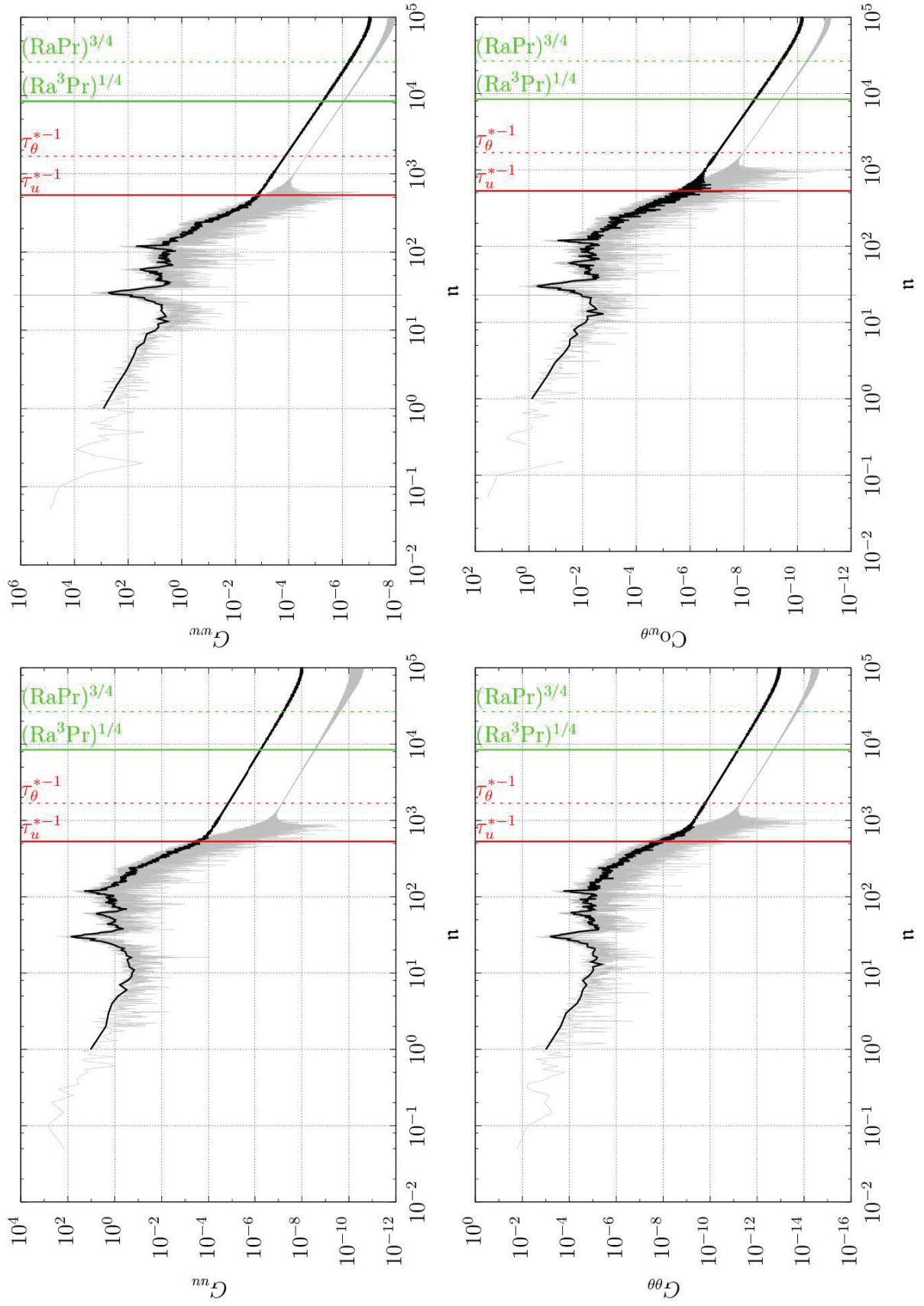


Figura 5.23: Autoespectros de U^* , W^* e Θ^{*} , e coespectro de W^* e Θ^{*} , típicos em escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 2$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

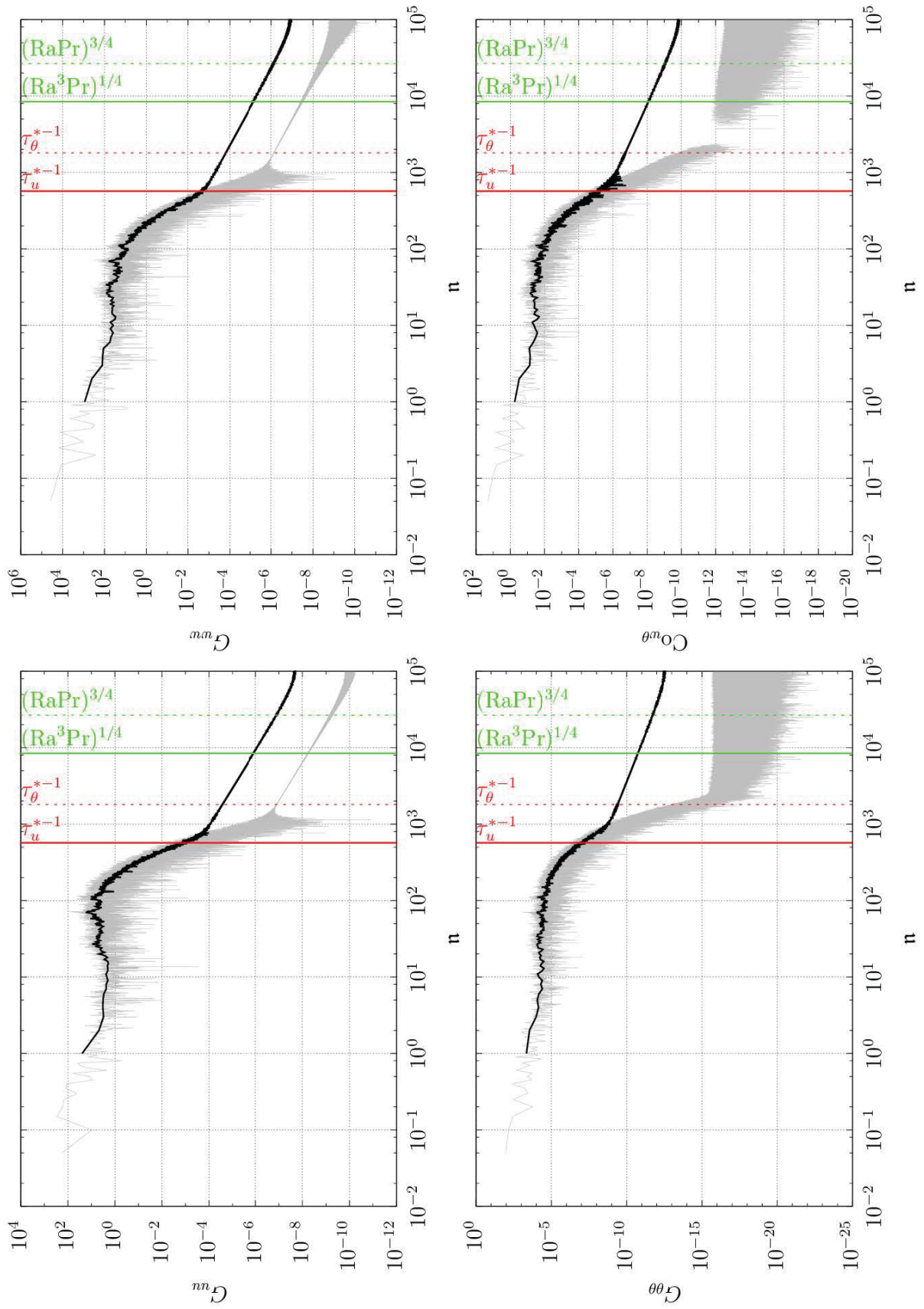


Figura 5.24: Autoespectros de U^* , W^* e Θ^{*} , e coespectro de W^* e Θ^{*} , típicos em escoamento com $Ra = 8 \times 10^4$ e $m = 1$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

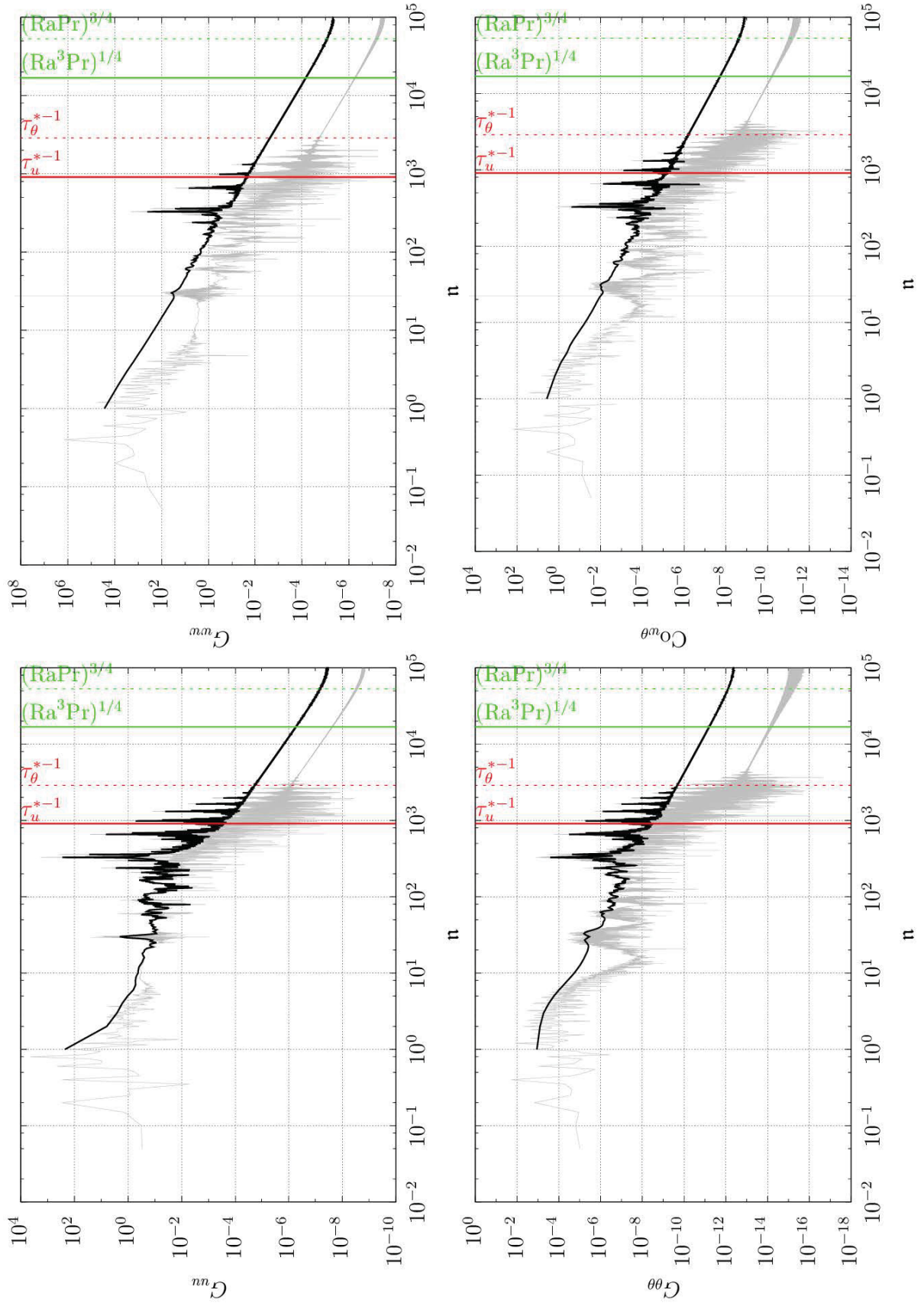


Figura 5.25: Autoespectros de U^* , W^* e Θ^* , e coespectro de W^* e Θ^* , típicos em escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 2$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

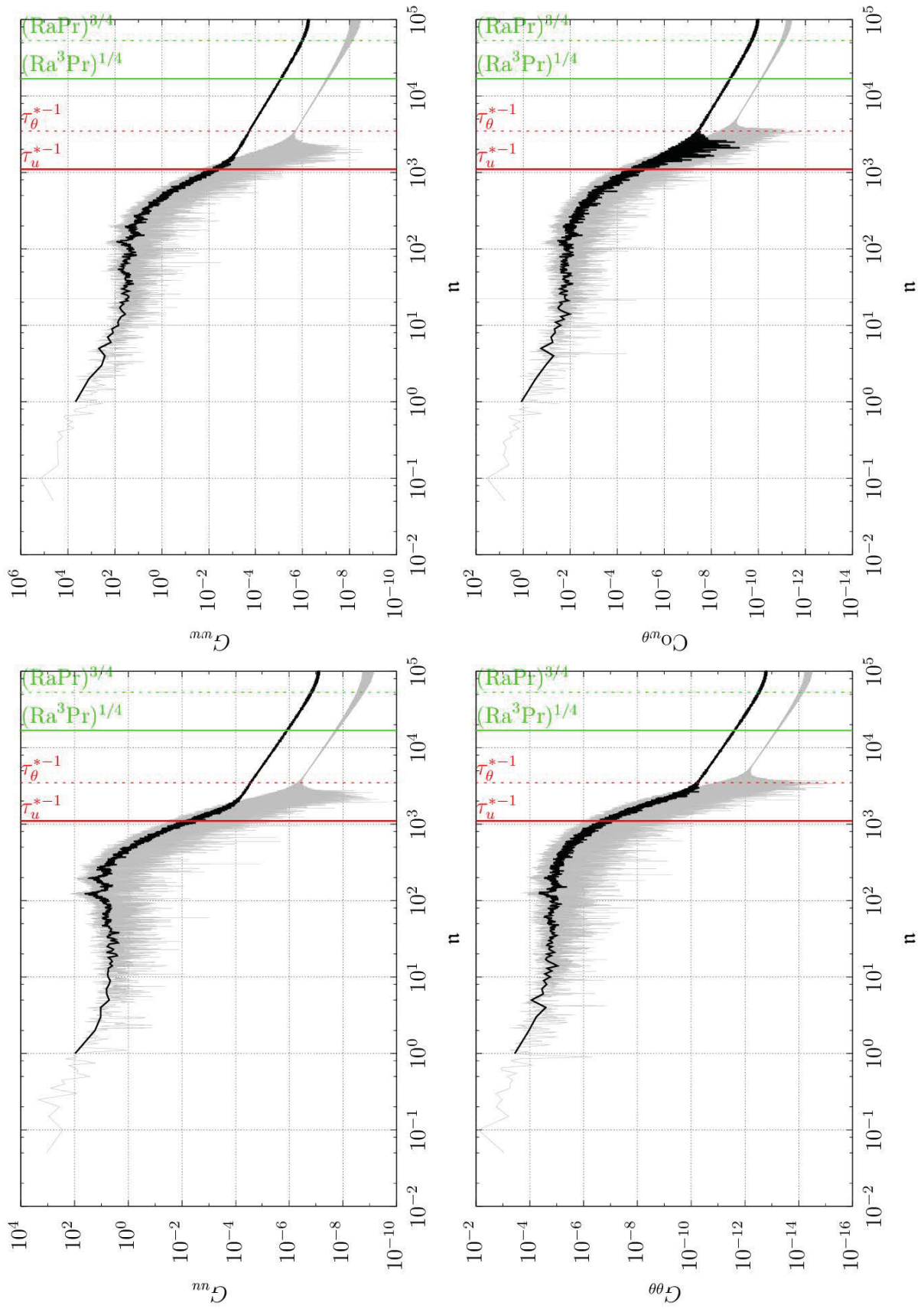


Figura 5.26: Autoespectros de U^* , W^* e Θ^* , e coespectro de W^* e Θ^* , típicos em escoamento com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 1$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

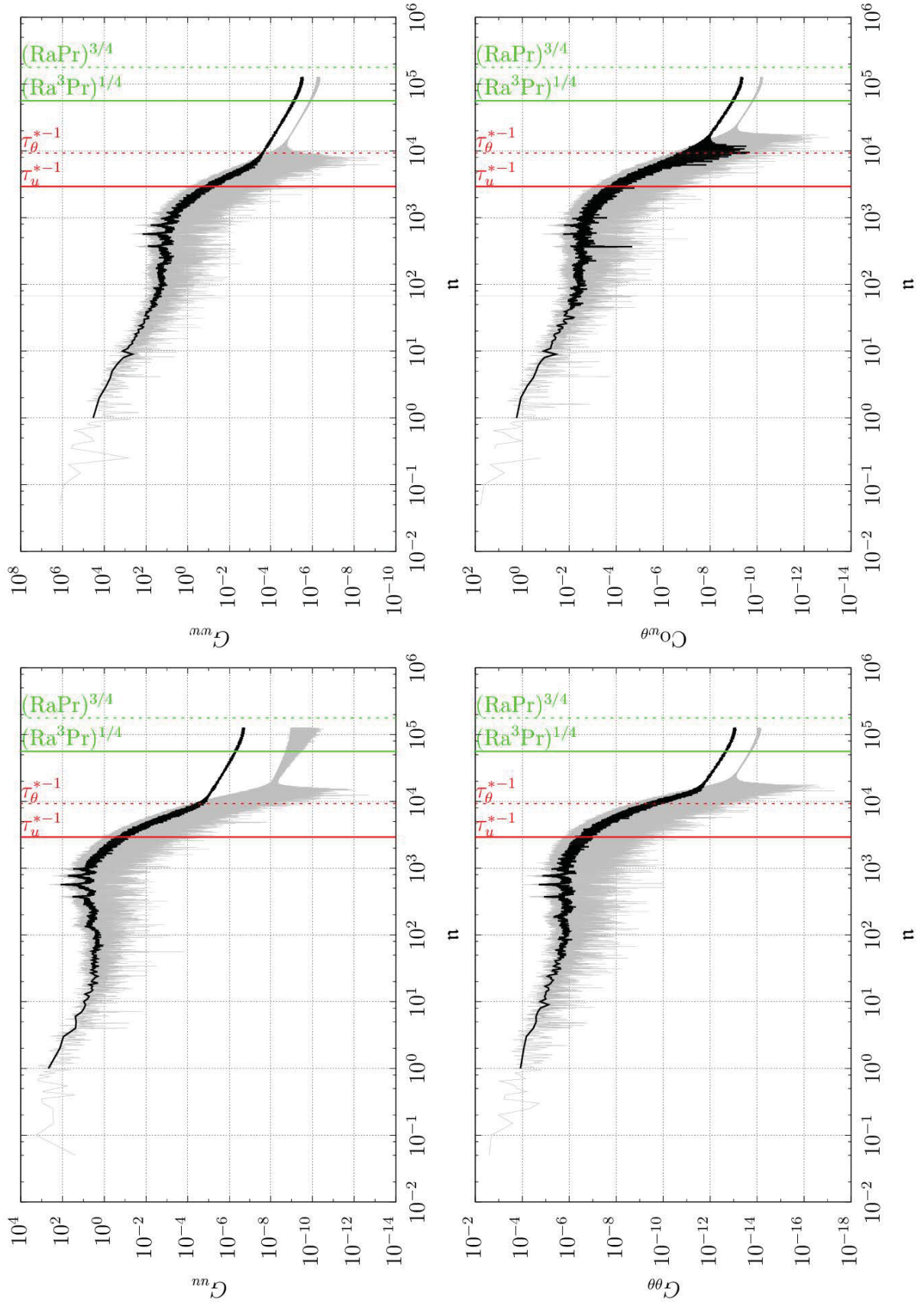


Figura 5.27: Autoespectros de U^* , W^* e $\Theta^{/*}$, e coespectro de W^* e $\Theta^{/*}$, típicos em escoamento com $Ra = 1 \times 10^6$ (periodogramas em cinza, e espectros de Bartlett em preto). As retas em vermelho (verde) correspondem aos valores determinados numericamente (teoricamente) das microescalas de Kolmogorov (linhas contínuas) e de Batchelor (linhas tracejadas).

5.3.2 Espaços de fase

Alternativamente às séries temporais apresentadas na seção 5.1, o comportamento de U^* , W^* e Θ^* no centro do domínio pode ser analisado em termos de um espaço de fase. Esta abordagem é discutida de maneira geral em [Greenberg \(2013, cap. 23\)](#), por exemplo. Em RBC, a solução estática é estável para $Ra < Ra_c$, de forma que a origem do espaço de fase, em que todas as flutuações de Boussinesq se anulam, comporta-se como um atrator pontual. Em regime de convecção estacionária, existem diversos atratores pontuais possíveis, e todos eles se localizam fora da origem. Para a determinação do espaço geométrico formado pela união de todos estes pontos para cada valor de Ra , sugere-se simular RBC diversas vezes a partir de diferentes condições iniciais.

Para $Ra = 4 \times 10^4$ (regime oscilatório), as trajetórias são atraídas para o que parece ser um ciclo-limite (figura 5.28), sugerindo que de fato tal regime corresponde a um escoamento periódico. Entretanto, em escoamentos com números de Rayleigh mais elevados, correspondentes ao regime turbulento, os espaços de fase são preenchidos por uma nuvem de pontos que ocupa diferentes regiões preferenciais do mesmo em cada caso. Contudo, tais regiões não consistem em um ponto ou um circuito fechado. Até mesmo nos escoamentos com $Ra = 2 \times 10^5$ e $m = 2$, em que as séries temporais apresentam certa periodicidade (figura 5.14) e os espectros apresentam picos discretos (figura 5.25), não percebe-se nenhum ciclo-limite aparente. As transições entre diferentes regimes também podem ser discutidas em termos de diagramas de bifurcação ([Kundu et al., 2016, p. 589](#)).

Finalmente, destaca-se que os gráficos da figura 5.28 sugerem que a correlação entre U^* e as outras variáveis é fraca, mas parece haver uma certa correlação positiva entre W^* e Θ^* . De fato, ilustrou-se na seção 5.1 que W^* e Θ^* em geral possuem o mesmo sinal, de forma que o fluxo de calor por advecção, dado pelo produto $W^*\Theta^*$, é positivo na maior parte do tempo.

5.3.3 Funções de autocorrelação

Com o objetivo de verificar se a razão de aspecto Γ adotada foi grande o suficiente, de forma que as condições de contorno periódicas em x^* não alterassem o escoamento excessivamente, calculou-se a função de autocorrelação $\varrho_{\theta\theta}(\Delta x^*)$. Esta foi definida como o coeficiente de correlação de Pearson entre as séries temporais de $\Theta^*(x^* = \Gamma/2, z^* = 1/2)$, a flutuação de temperatura avaliada no ponto central do domínio (fixo), e de $\Theta^*(x^* = \Delta x^* + \Gamma/2, z^* = 1/2)$. Considerando que tal função satisfaz as propriedades

$$\begin{aligned}\varrho_{\theta\theta}(\Delta x^*) &= \varrho_{\theta\theta}(-\Delta x^*), \\ \varrho_{\theta\theta}(\Delta x^* + \Gamma) &= \varrho_{\theta\theta}(\Delta x^*),\end{aligned}$$

variou-se Δx^* apenas de 0 a $\Gamma/2$, ou seja, tal função foi calculada sobre o segmento de reta que liga os pontos $(\Gamma/2, 1/2)$ e $(\Gamma, 1/2)$.

Curvas $\varrho_{\theta\theta}(\Delta x^*)$ típicas para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento estão ilustradas na figura 5.29. Para $Ra = 4 \times 10^4$, tal curva apresenta comportamento periódico, decaindo até valores próximos de 0,2 e logo em seguida crescendo novamente até quase a unidade já para $\Delta x^* \approx 1,0$. Para valores mais elevados de Ra , na configuração $m = 1$, $\varrho(\Delta x^*)$ de fato caiu rapidamente (para separações $\Delta x \lesssim \Gamma/2$) até quase zero, de maneira bastante semelhante ao representado hipoteticamente na figura 4.4, como [Moin e Mahesh \(1998\)](#) indicam que deve ocorrer quando impõe-se um comprimento de periodicidade Γ suficientemente grande. Por outro lado, em escoamentos com $m = 2$ pares de células convectivas, a função de autocorrelação oscila, crescendo com Δx^* em alguns trechos. Para obter o restante das curvas para Δx^* entre $\Gamma/2$ e Γ , basta refleti-las em relação a $\Delta x^* = \Gamma/2$.

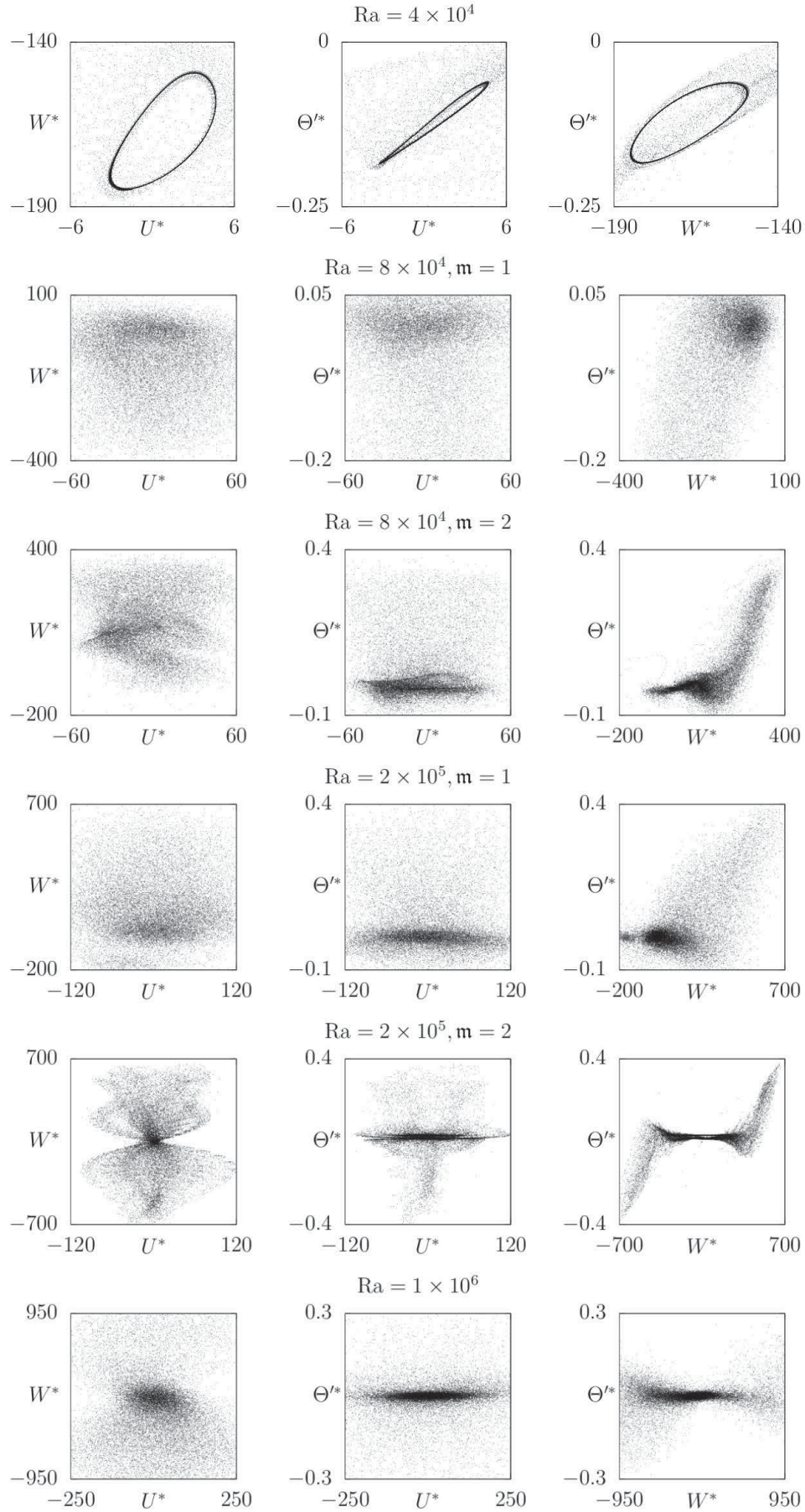


Figura 5.28: Projeções bidimensionais das trajetórias percorridas em um espaço de fase pelas variáveis avaliadas em $(x^*, z^*) = (1/2, \Gamma/2)$ para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.

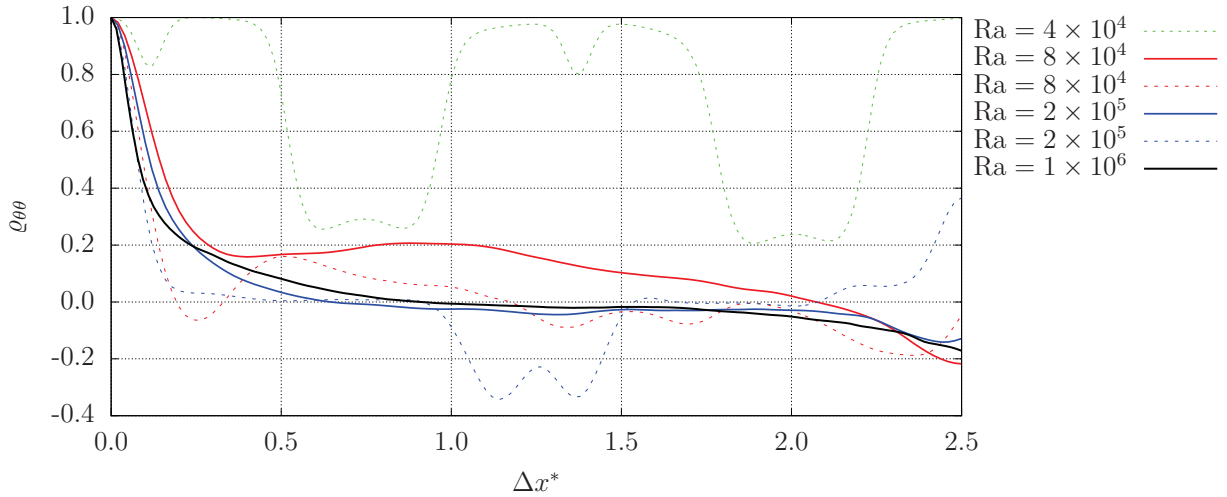


Figura 5.29: Comportamento típico do coeficiente de correlação de Pearson entre as séries temporais de Θ^* avaliado no centro do escoamento e na posição $(x^*, z^*) = (\Gamma/2 + \Delta x^*, 1/2)$ para diferentes números de Rayleigh. As linhas contínuas (tracejadas) referem-se à configuração $m = 1$ ($m = 2$).

5.3.4 Taxas de dissipação e microescalas

Na seção 5.2.3, discutiu-se a dependência entre a taxa de dissipação da energia cinética (total, $\epsilon_M^* + \epsilon^*$, e média em x^*z^*) e o número de Rayleigh. A partir do valor médio estimado de ϵ^* , foram determinados os valores médios das microescalas da turbulência, baseados nos quais definiu-se a espessura da malha utilizada nas simulações numéricas. Entretanto, ilustrou-se na figura 5.19 como a taxa de dissipação da energia cinética é variável no espaço. Considerando que as microescalas de Kolmogorov são dadas por

$$\eta_u^*(x^*, z^*) \sim \left[\frac{\text{Pr}^3}{\epsilon^*(x^*, z^*)} \right]^{1/4}, \quad \tau_u^*(x^*, z^*) \sim \left[\frac{\text{Pr}}{\epsilon^*(x^*, z^*)} \right]^{1/2}, \quad (5.14)$$

as mesmas também são funções da posição no espaço (mas não do tempo, pois ϵ^* é uma média probabilística, e supôs-se que o escoamento é estatisticamente estacionário). Assim, uma grade numérica que resolve a microescala média não necessariamente resolve as microescalas em todos os pontos do domínio.

Para obtermos uma ideia da resolução efetivamente proporcionada pela espessura da malha e pelo passo de tempo adotados, foram determinadas numericamente as microescalas de comprimento e de tempo na seção horizontal $z^* = 1/2$ e na seção vertical $x^* = \Gamma/2$ do domínio. Para isso, ϵ^* foi obtido como uma média temporal diretamente a partir do campo de velocidade através de (5.12). Para efeitos de comparação, também determinou-se ϵ_M^* via (5.11).

Os perfis verticais de ϵ_M^* , ϵ^* , η_u^*/h e $\tau_u^*/\Delta t$ na seção $x^* = \Gamma/2$, e em seguida os perfis horizontais de tais variáveis na posição intermediária entre as placas, $z^* = 1/2$, estão ilustrados separadamente para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento nas figuras de 5.30 a 5.35. De forma geral, há mais dissipação nas regiões próximas às placas, o que faz com que as microescalas sejam menores nestes locais e apresentem picos em posições z^* intermediárias. Com exceção do escoamento com $\text{Ra} = 4 \times 10^4$ (figura 5.30), verificou-se o bem conhecido resultado $\epsilon_M^* \ll \epsilon^*$, que torna-se progressivamente mais verdadeiro conforme aumenta-se Ra . Para $\text{Ra} = 1 \times 10^6$ (figura 5.35), por exemplo, $\epsilon^* \sim 10^2 \epsilon_M^*$. Em particular, para o escoamento oscilatório que ocorreu para $\text{Ra} = 2 \times 10^5$, verificou-se $\epsilon^* \sim 10^3 \epsilon_M^*$ (figura

5.34). Ademais, percebe-se que, conforme aumenta-se Ra , ε^* (e, consequentemente as microescalas) varia cada vez menos em x^* , sugerindo que RBC torna-se estatisticamente homogêneo na direção x^* em regime turbulento.

Nas seções analisadas, a microescala de Kolmogorov é sempre igual a várias vezes a espessura da malha utilizada no método numérico, e o critério de estabilidade numérica faz com que a microescala de tempo seja igual a pelo menos centenas de vezes o passo de tempo. Em geral, h e Δt também superam as microescalas de Batchelor, obtidas dividindo-se as microescalas de Kolmogorov por $\sqrt{Pr} = \sqrt{10} \approx 3,16$. Empiricamente, verificou-se que, para $Ra \lesssim 10^7$, $\chi_\theta = h/\eta_\theta^* \lesssim 4$ fornece uma resolução adequada. Em outras palavras, uma malha de espessura igual a quatro vezes o valor estimado da microescala de Batchelor é suficiente para a simulação direta de RBC bidimensional. Escoamentos simulados com malhas mais espessas começam a ter algumas características alteradas, tais como as estatísticas globais discutidas na seção 5.2.

Destaca-se que χ_θ é definido na equação (4.33) em termos da subestimativa de η_u^* dada por $(Pr/Ra)^{3/8}$. Entretanto, verificou-se através dos espectros que a maior parte da dissipação da energia cinética do escoamento ocorre em escalas maiores até mesmo que as microescalas verdadeiras. Usando a aproximação $\varepsilon^* \sim (RaPr)^{4/3}/10$ (baseada em (5.15), obtida com os resultados do presente estudo) na equação (5.14), verifica-se que o valor médio da microescala de comprimento obtido neste estudo foi

$$\eta_u^* \sim 1,8Ra^{-1/3}Pr^{5/12}.$$

Comparando tal resultado com a estimativa inicial, encontra-se

$$\frac{1,8Ra^{-1/3}Pr^{5/12}}{Ra^{-3/8}Pr^{3/8}} = 1,8(RaPr)^{1/24},$$

que é igual a aproximadamente 3,9 para $Pr = 10$ (fixo) e $Ra = 10^7$ (valor máximo simulado no presente estudo). Portanto, como regra prática, pode-se adotar que a resolução necessária para o DNS de RBC bidimensional é

$$h \lesssim \frac{4}{\sqrt{Pr}} \left(\frac{Pr}{Ra} \right)^{3/8}. \quad (5.17)$$

Tal espessura é ligeiramente superior à microescala de Batchelor média em todo o domínio x^*z^* para $Ra \lesssim 10^7$, mas a maior parte da dissipação da TKE ocorre em escalas de comprimento superiores a h . É válido ressaltar que, em princípio, tal regra prática se aplica apenas para $Pr = 10$ e para as condições de contorno discutidas na seção 3.3.1. Além disso, na presença de um escalar passivo com $Le < 1$, tal regra torna-se

$$h \lesssim \frac{4}{\sqrt{Sc}} \left(\frac{Pr}{Ra} \right)^{3/8}.$$

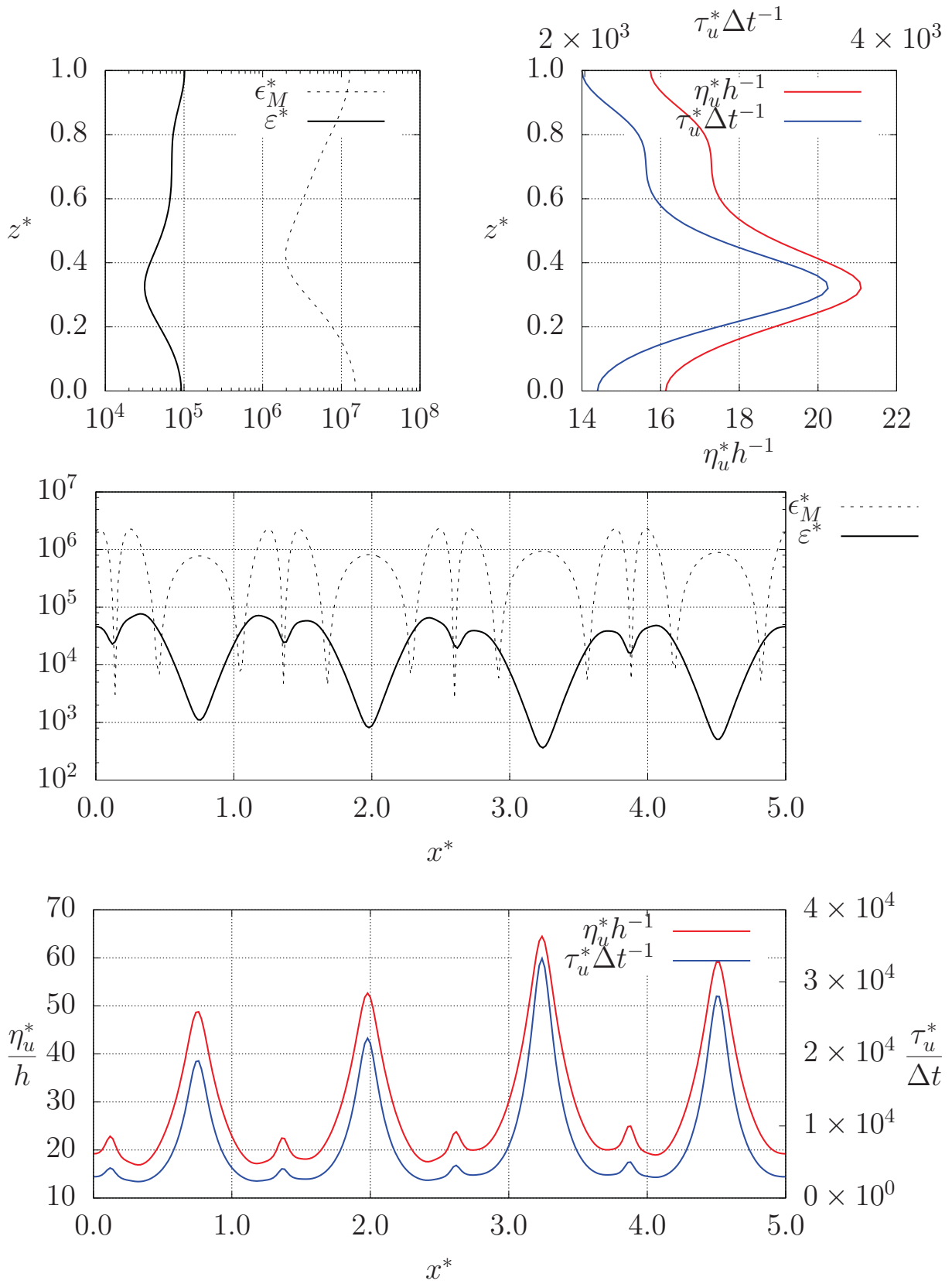


Figura 5.30: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 4 \times 10^4$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.

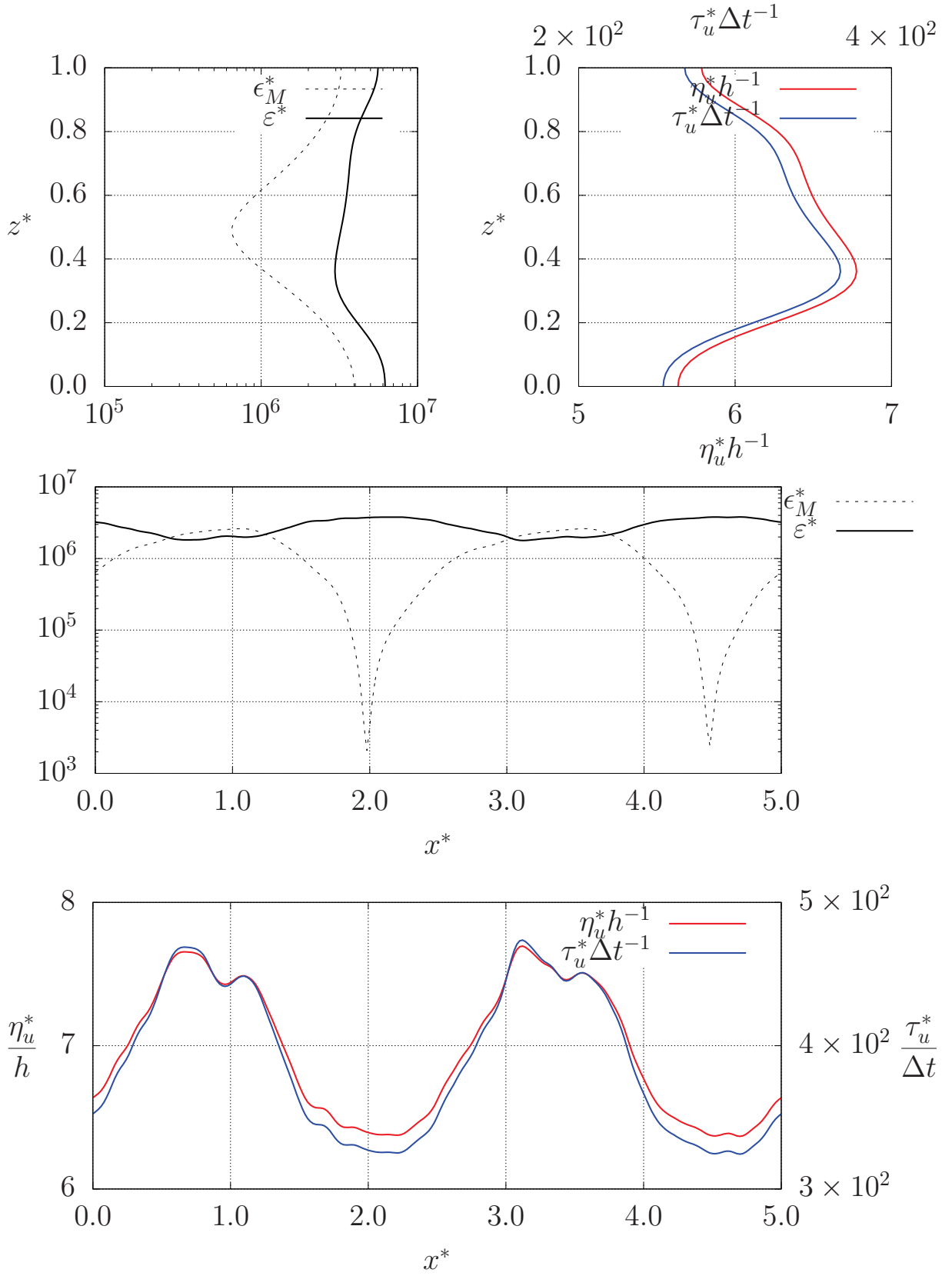


Figura 5.31: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 8 \times 10^4$, $m = 1$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.

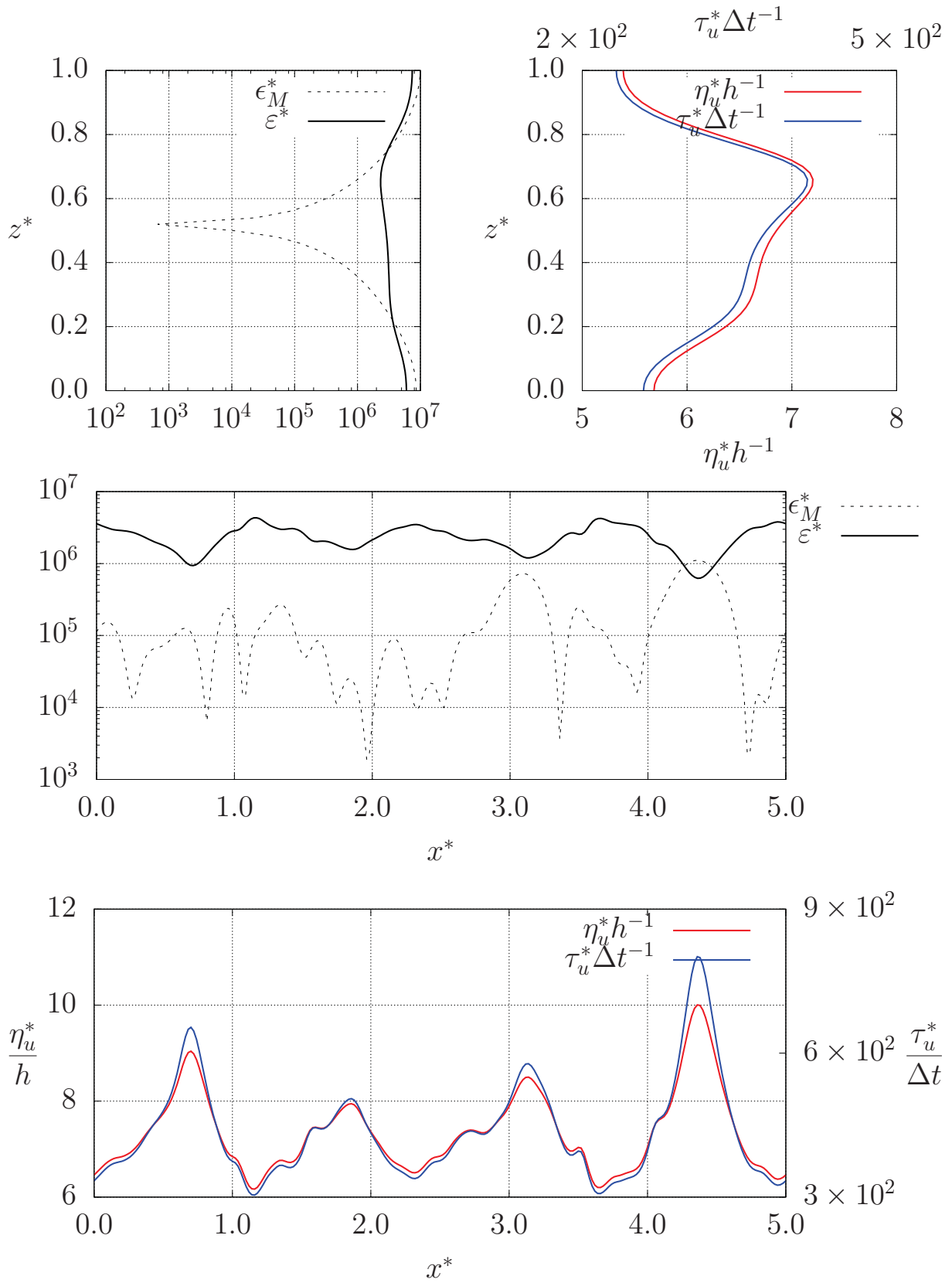


Figura 5.32: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 8 \times 10^4$, $m = 2$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.

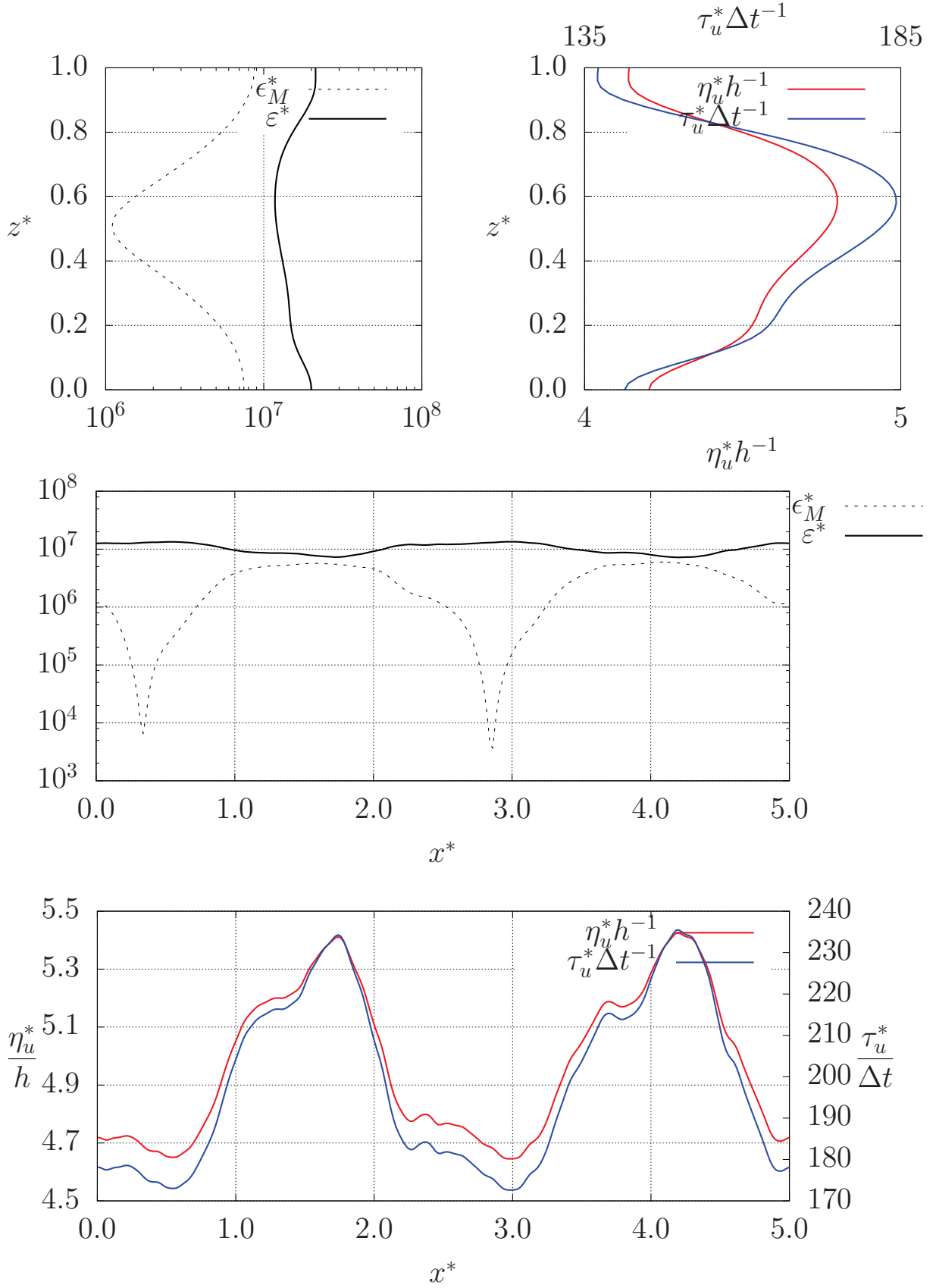


Figura 5.33: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 2 \times 10^5$, $m = 1$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.

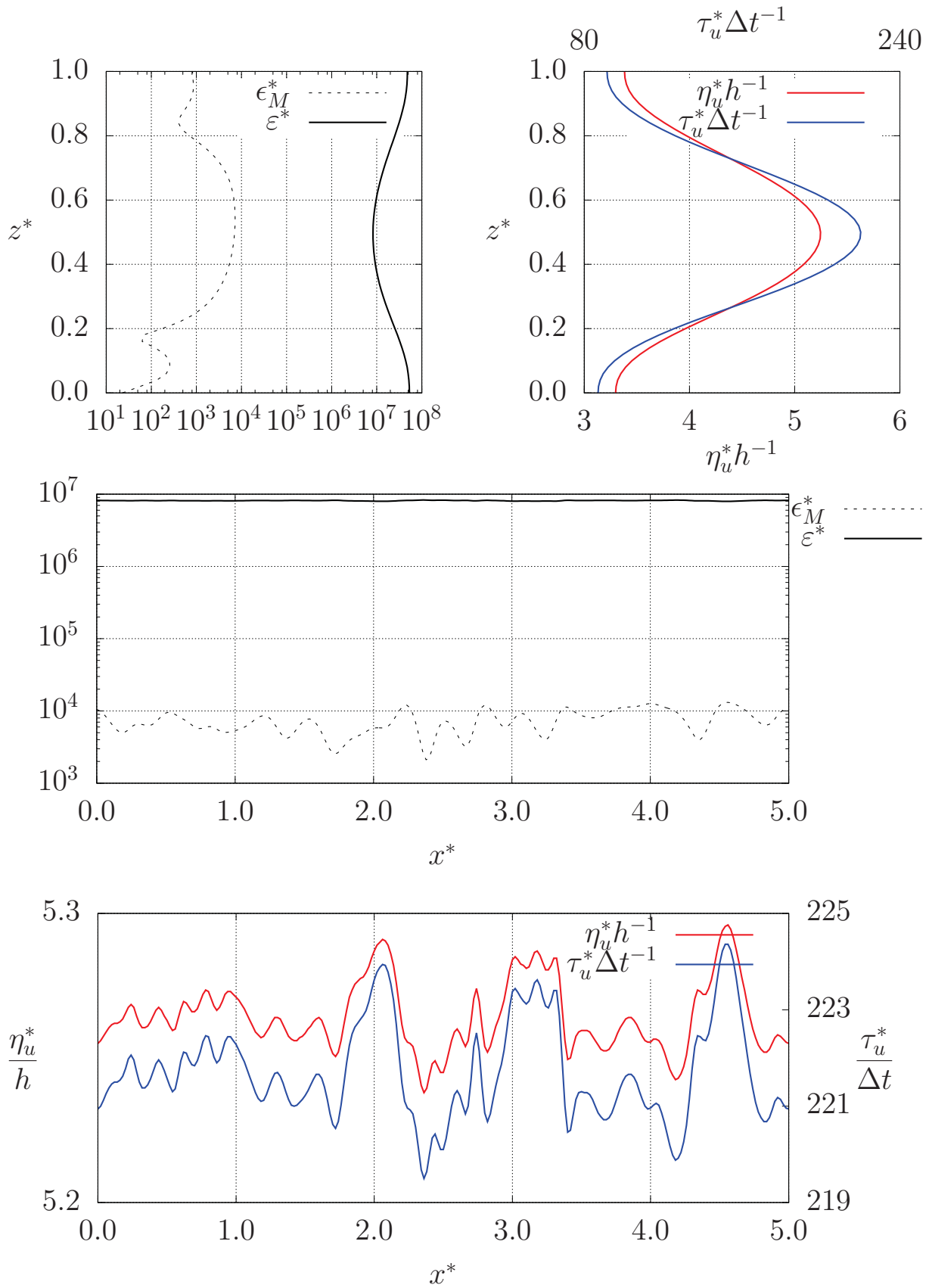


Figura 5.34: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicos para $Ra = 2 \times 10^5$, $m = 2$, $N_z = 50$ e $\Delta t = 5 \times 10^{-6}$.

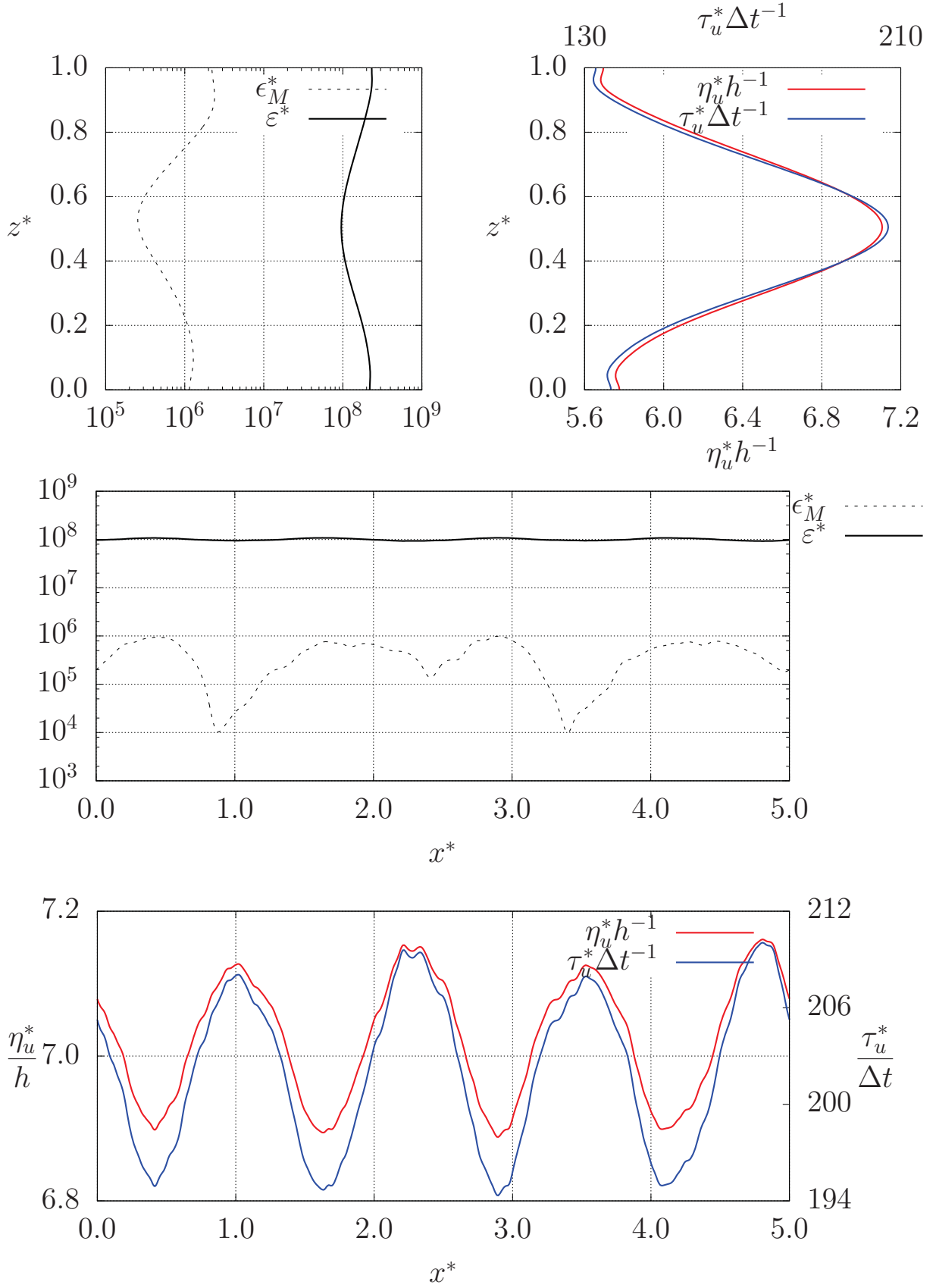


Figura 5.35: Perfis verticais (em $x^* = \Gamma/2$) e horizontais (em $z^* = 1/2$) da taxa de dissipação da energia cinética e das microescalas típicas para $Ra = 1 \times 10^6$, $N_z = 125$ e $\Delta t = 1,5625 \times 10^{-6}$.

5.4 Equações de Lorenz

Alguns resultados obtidos a partir das equações de Lorenz (1963) (equações (3.53), (3.55) e (3.56), que não incluem o escalar passivo) são discutidos nesta seção. Este sistema de EDOs foi resolvido numericamente via RK4 para diversos valores do número de Rayleigh (apresentados no texto em termos de r , definido na equação (3.48)). Primeiramente, são discutidos os diferentes regimes de escoamento previstos por tais equações. Em seguida, uma expressão analítica para o número de Nusselt é obtida em termos dos coeficientes de Lorenz. Uma discussão detalhada das características do escoamento (incluindo os perfis verticais de velocidade, temperatura e dos fluxos de calor por condução e advecção) conforme previsto pelas equações de Lorenz para diferentes números de Rayleigh é feita por Rodakoviski e Dias (2018).

5.4.1 Soluções estacionárias e não-periódicas

Na condição $r < 1$, equivalente a $Ra < Ra_c$, perturbações inicialmente impostas sobre os coeficientes de Lorenz decaem para zero, de forma que o regime estático é recuperado. Nesta situação, há apenas fluxo de calor por condução e, em um espaço de fase em que as coordenadas são dadas por A , B e C , a origem é um atrator. Para $Ra < Ra_c$, portanto, o sistema de Lorenz retorna a solução exata de RBC.

Para $1 < r < r_c$, em que o valor crítico r_c é dado por (3.61), as equações de Lorenz possuem duas soluções estacionárias não-triviais possíveis, que são $(\pm A_\infty, \pm B_\infty, C_\infty)$, sendo os valores dos coeficientes dados pelas equações (3.58)–(3.60). Cada uma destas soluções corresponde a um atrator pontual em um espaço de fase (ilustrado na figura 5.36). Embora RBC também seja estacionário para aproximadamente os mesmos valores de Ra , o sistema de Lorenz não retorna a sua solução exata. Primeiramente, enquanto, em RBC, o número de onda m é consequência dos parâmetros adimensionais do sistema e de suas condições iniciais e de contorno, o valor de a deve ser fixado a priori no sistema de Lorenz. Das séries de Fourier (3.51) e (3.52), tem-se que tais variáveis estão relacionadas através de

$$a = \frac{2m}{\Gamma}.$$

Assim, calculando os valores de a correspondentes a $m = 1$ e 2 , obtém-se r_c via (3.61) e, consequentemente, os valores de Ra referentes ao limite superior do regime estacionário das equações de Lorenz, representados na figura 5.15.

As duas soluções estacionárias não-triviais do sistema de Lorenz (sendo uma delas ilustrada na figura 5.37) diferem apenas no sentido do escoamento. De maneira equivalente, pode-se dizer que cada uma destas soluções é obtida transladando-se a outra em uma distância igual a a^{-1} na direção x^* . Entretanto, destacou-se na seção 5.1 que, em RBC, as células convectivas não se desenvolvem preferencialmente em nenhuma posição x^* , de maneira que é possível obter infinitas soluções a partir da translação de uma única solução em uma distância arbitrária. Chen e Price (2006) corrigem esta limitação do sistema de Lorenz incluindo dois coeficientes adicionais nas séries de Fourier.

Contudo, a diferença entre o sistema de Lorenz e RBC não consiste apenas na posição horizontal das células convectivas. Comparando os escoamentos apresentados na figura 5.3, obtidos via DNS, àquele ilustrado na figura 5.37, obtido via equações de Lorenz, percebe-se que as últimas preveem apenas uma pequena oscilação do campo de temperatura em relação ao estado de referência estratificado, não permitindo a formação de térmicas ascendentes e correntes frias de subsidência bem definidas, como ocorre de fato em RBC. Sendo assim, o

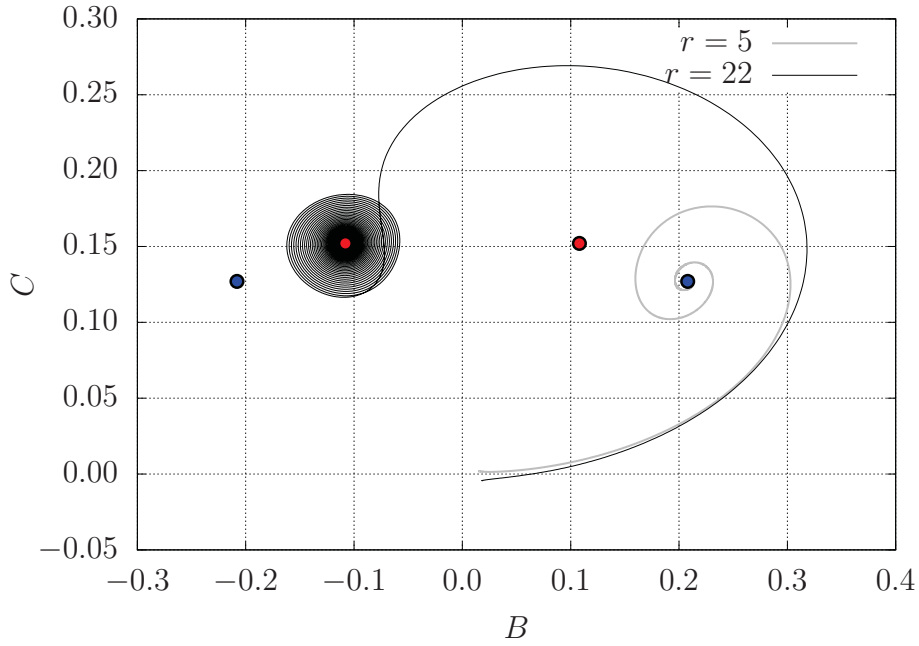


Figura 5.36: Projeção no plano BC das trajetórias descritas em um espaço de fase pelas equações de Lorenz em regime estacionário para diferentes números de Rayleigh. As coordenadas dos atratores (em azul para $r = 5$, e em vermelho para $r = 22$) são dadas pelas equações (3.58)–(3.60).

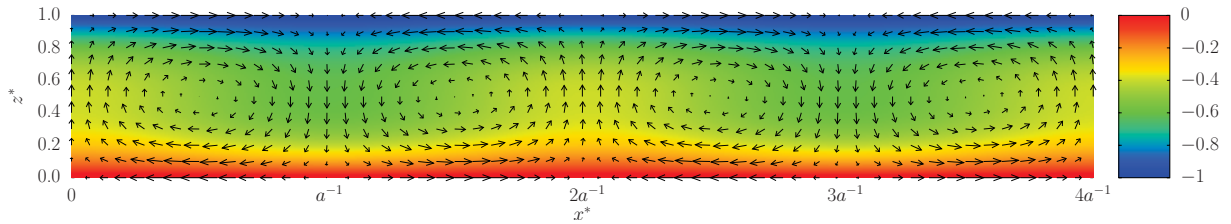


Figura 5.37: Campos de temperatura adimensional $\Theta^* - \Theta_0^*$ (cores) e velocidade (vetores) previstos pelas equações de Lorenz para $r = 22$ ($Ra \approx 1,45 \times 10^4$).

truncamento das séries de Fourier (3.51) e (3.52) para conter apenas 3 coeficientes altera a solução do problema até mesmo para números de Rayleigh bastante baixos.

Para $r > r_c$, as soluções estacionárias das equações de Lorenz tornam-se instáveis, dando lugar a soluções não-periódicas. Em um espaço de fase, tais soluções convergem para atratores estranhos, cujos focos possuem coordenadas $(\pm A_\infty, \pm B_\infty, C_\infty)$, conforme ilustrado na figura 5.38. Destaca-se que o valor crítico Ra_c , deduzido a partir das equações de conservação linearizadas, determina a condição de estabilidade da solução estática de RBC, a qual aplica-se com exatidão também às equações de Lorenz. Por outro lado, o valor crítico r_c é deduzido a partir das equações de Lorenz, razão pela qual as soluções estacionárias de RBC não necessariamente tornam-se instáveis para exatamente os valores correspondentes de Ra . Entretanto, percebe-se na figura 5.15 que soluções estacionárias tornam-se instáveis aproximadamente para a mesma faixa de valores de Ra (em torno de 10^4) de acordo com Busse (1978), o DNS desenvolvido no presente estudo, e as equações de Lorenz (1963).

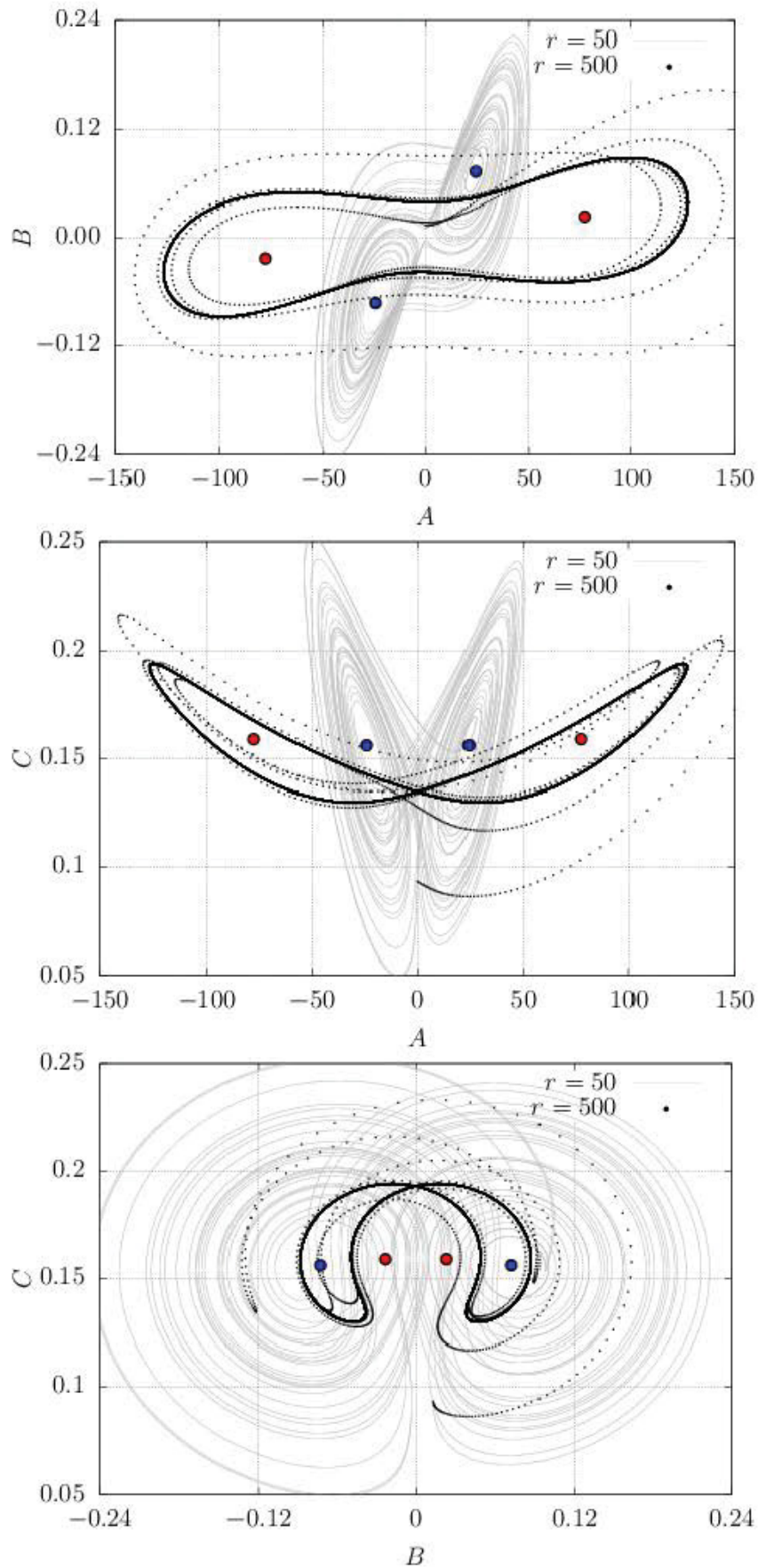


Figura 5.38: Projeções bidimensionais das trajetórias descritas em um espaço de fase pelas equações de Lorenz em regime caótico para diferentes números de Rayleigh. As coordenadas dos focos dos atratores (em azul para $r = 50$, e em vermelho para $r = 500$) são dadas pelas equações (3.58)–(3.60).

5.4.2 Número de Nusselt

A previsão dada pelas equações de Lorenz para o número de Nusselt pode ser obtida substituindo-se as séries de Fourier de Θ^* (dada por (3.52)) e W^* (obtida a partir de (3.51)) na expressão (5.2) para Nu_θ . O termo referente à condução de calor pode ser escrito como

$$-\frac{d\langle\Theta'^*\rangle_{x,t}}{dz^*} = -\pi \langle B(t^*) \rangle_t \langle \cos(\pi a x^*) \rangle_x \cos(\pi z^*) + 2\pi \langle C(t^*) \rangle_t \cos(2\pi z^*).$$

Da definição da função corrente (3.39),

$$W^* = \pi a A(t^*) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*),$$

e o termo advectivo torna-se

$$\begin{aligned} \langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t} &= \pi a \langle A(t^*) B(t^*) \rangle_t \langle \cos^2(\pi a x^*) \rangle_x \sin^2(\pi z^*) \\ &\quad - \pi a \langle A(t^*) C(t^*) \rangle_t \langle \cos(\pi a x^*) \rangle_x \sin(\pi z^*) \sin(2\pi z^*). \end{aligned}$$

Tais expressões podem ser simplificadas tomando-se a média das equações de Lorenz e supondo que suas soluções são estatisticamente estacionárias. Usando o resultado adicional $\langle A \rangle = 0$ obtido por Rodakoviski e Dias (2018), tem-se que

$$\langle A \rangle = \langle B \rangle = \langle AC \rangle = 0, \quad (5.18)$$

$$\langle AB \rangle = \frac{8}{a} \langle C \rangle. \quad (5.19)$$

Assim, o termo de condução pode ser reescrito apenas como

$$-\frac{d\langle\Theta'^*\rangle_{x,t}}{dz^*} = 2\pi \langle C \rangle \cos(2\pi z^*),$$

e o termo advectivo simplifica para

$$\langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t} = 8\pi \langle C \rangle \langle \cos^2(\pi a x^*) \rangle_x \sin^2(\pi z^*).$$

A média na direção horizontal deve ser calculada ao longo de todo o comprimento do domínio. De forma geral,

$$\langle \cos^2(\pi a x^*) \rangle_x = \frac{1}{\Gamma} \int_0^\Gamma \cos^2(\pi a x^*) dx^* = \frac{1}{4} \left[\frac{\sin(2\pi a \Gamma)}{\pi a \Gamma} + 2 \right].$$

Para $a^2 = 1/2$ e $\Gamma = 5$, esta média resulta em aproximadamente 0,495. Se o número de onda a for tal que o domínio contenha um número inteiro m de comprimentos de onda (como ocorre na prática), fazemos $a = 2m/\Gamma$, e

$$\frac{1}{\Gamma} \int_0^\Gamma \cos^2\left(\frac{2\pi m x^*}{\Gamma}\right) dx = \frac{1}{4} \left[\frac{\sin(4m\pi)}{2m\pi} + 2 \right] = \frac{1}{2},$$

resultando em

$$\langle W^* \Theta'^* \rangle_{x,t} = 4\pi \langle C \rangle \sin^2(\pi z^*). \quad (5.20)$$

Assim, o número de Nusselt pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \text{Nu}_\theta &= 1 + 2\pi \langle C \rangle \cos(2\pi z^*) + 4\pi \langle C \rangle \sin^2(\pi z^*), \\ \text{Nu}_\theta &= 1 + 2\pi \langle C \rangle [\cos^2(\pi z^*) - \sin^2(\pi z^*)] + 4\pi \langle C \rangle \sin^2(\pi z^*), \\ \text{Nu}_\theta &= 1 + 2\pi \langle C \rangle [1 - 2\sin^2(\pi z^*)] + 4\pi \langle C \rangle \sin^2(\pi z^*), \\ \text{Nu}_\theta &= 1 + 2\pi \langle C \rangle. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Note que, assim como verificado via DNS, a expressão analítica para o número de Nusselt em termos dos coeficientes de Lorenz não possui nenhuma dependência em relação à coordenada vertical, muito embora não tenha sido realizada uma integração nesta direção. Usando a aproximação

$$\langle C \rangle \sim 193,779 C_\infty^{3,882}$$

obtida por [Rodakoviski e Dias \(2018\)](#), e substituindo C_∞ dado por (3.60), encontra-se

$$\text{Nu}_\theta \sim 1 + 0,970 \left(1 - \frac{27\pi^4}{4\text{Ra}} \right)^{3,882}. \quad (5.22)$$

Entretanto, note que o limite da expressão acima quando $\text{Ra} \rightarrow \infty$ é igual a 1,970, enquanto Nu_θ calculado via DNS atinge valores próximos a 50 para $\text{Ra} \sim 10^7$, revelando como as equações de Lorenz são inadequadas para prever o número de Nusselt em escoamentos com números de Rayleigh elevados.

Finalmente, destaca-se que (5.18) implica no fato que a escala de velocidade \mathcal{U}^* definida em (5.7) é sempre nula (e, consequentemente, o número de Reynolds), pois A é o único coeficiente de ambas as séries de Fourier de U^* e W^* . Outra escala de velocidade (que se baseie nas variâncias $\langle u^{*2} \rangle + \langle w^{*2} \rangle$ e, portanto, em $\langle A^2 \rangle$, por exemplo), deve ser utilizada alternativamente.

Capítulo 6

Similaridade entre escalares

Foram realizadas no total 28 simulações incluindo o escalar passivo. Os valores do número de Lewis adotados foram 0,1, 0,2, 0,5, 1,0, 2,0, 5,0 e 10,0, que correspondem aproximadamente a $10^{n/3}$ para $n = -3, \dots, 3$. Os valores simulados do número de Rayleigh foram 4×10^4 , 8×10^4 , 2×10^5 e 1×10^6 , elevados o suficiente para que não ocorram soluções permanentes. Por outro lado, o custo computacional limitou o maior valor de Ra simulado com inclusão do escalar passivo para 10^6 (ao invés de 10^7) pois, quando $Le < 1$, tem-se de (3.37) que $Sc > Pr$ e, portanto, $\eta_q < \eta_\theta$.

As figuras 6.1 e 6.2 ilustram o efeito da difusividade molecular do escalar passivo em sua dispersão no escoamento. Embora o aspecto geral do campo do escalar passivo seja bastante semelhante ao campo de temperatura, as estruturas (tais como as plumas e as camadas-limite) tornam-se mais estreitas conforme Le diminui. Assim, o campo do escalar passivo com baixa difusividade molecular apresenta fortes gradientes bastante localizados no espaço, enquanto o campo do escalar passivo com elevada difusividade molecular apresenta gradientes suaves ao longo de todo o domínio.

A seguir, são apresentadas e discutidas as diferentes medidas de similaridade entre os escalares, tais como o coeficiente de correlação entre suas séries temporais, a razão entre seus fluxos turbulentos e o coeficiente de correlação espectral. Também é verificada a previsão das equações de Lorenz para a similaridade entre Θ e Q , e discute-se a validade do modelo da difusividade turbulenta para RBC.

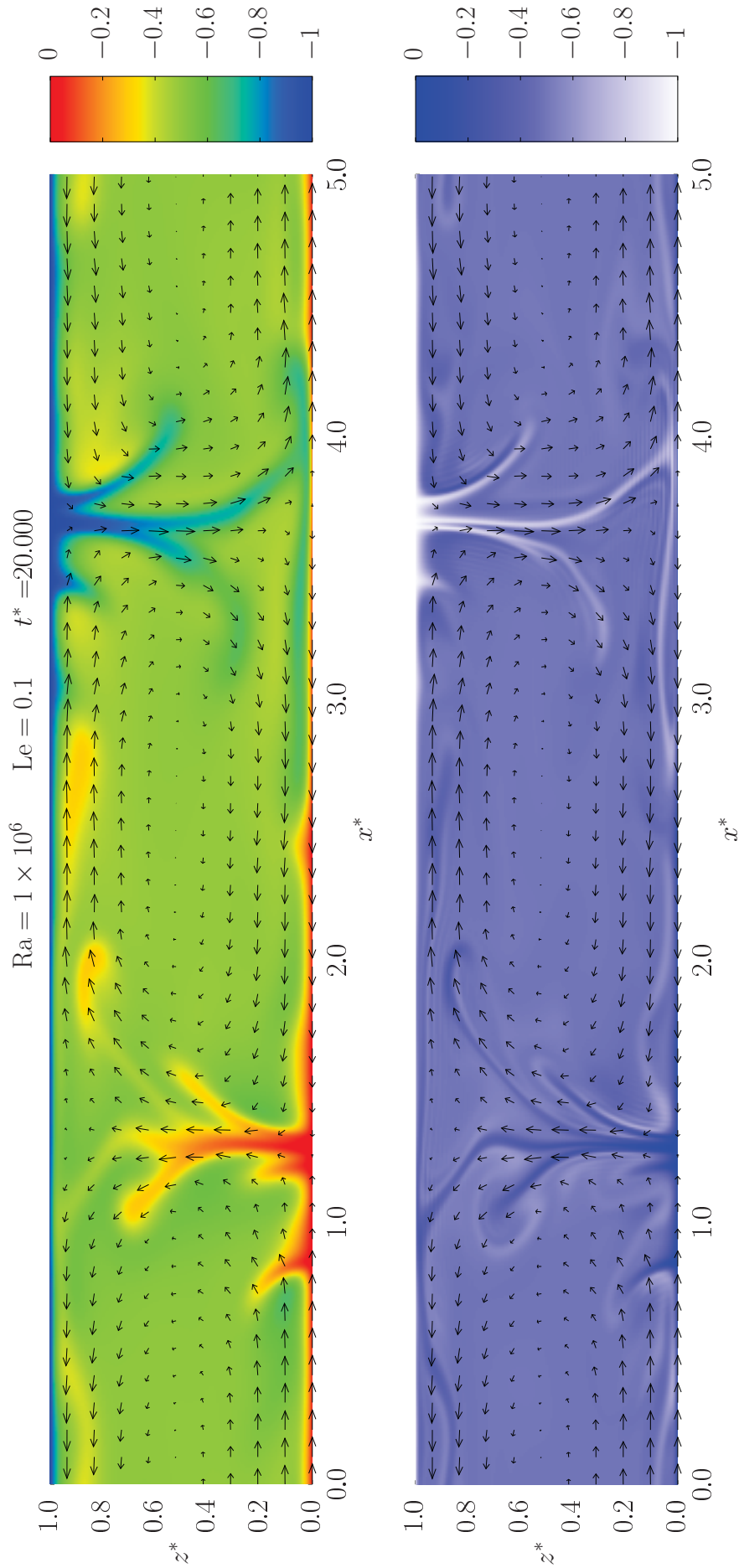


Figura 6.1: Campos de temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$ (acima) e do escalar passivo $Q^* - Q_0^*$ com $Le = 0,1$ (abaixo) determinados via DNS para $Ra = 10^6$.

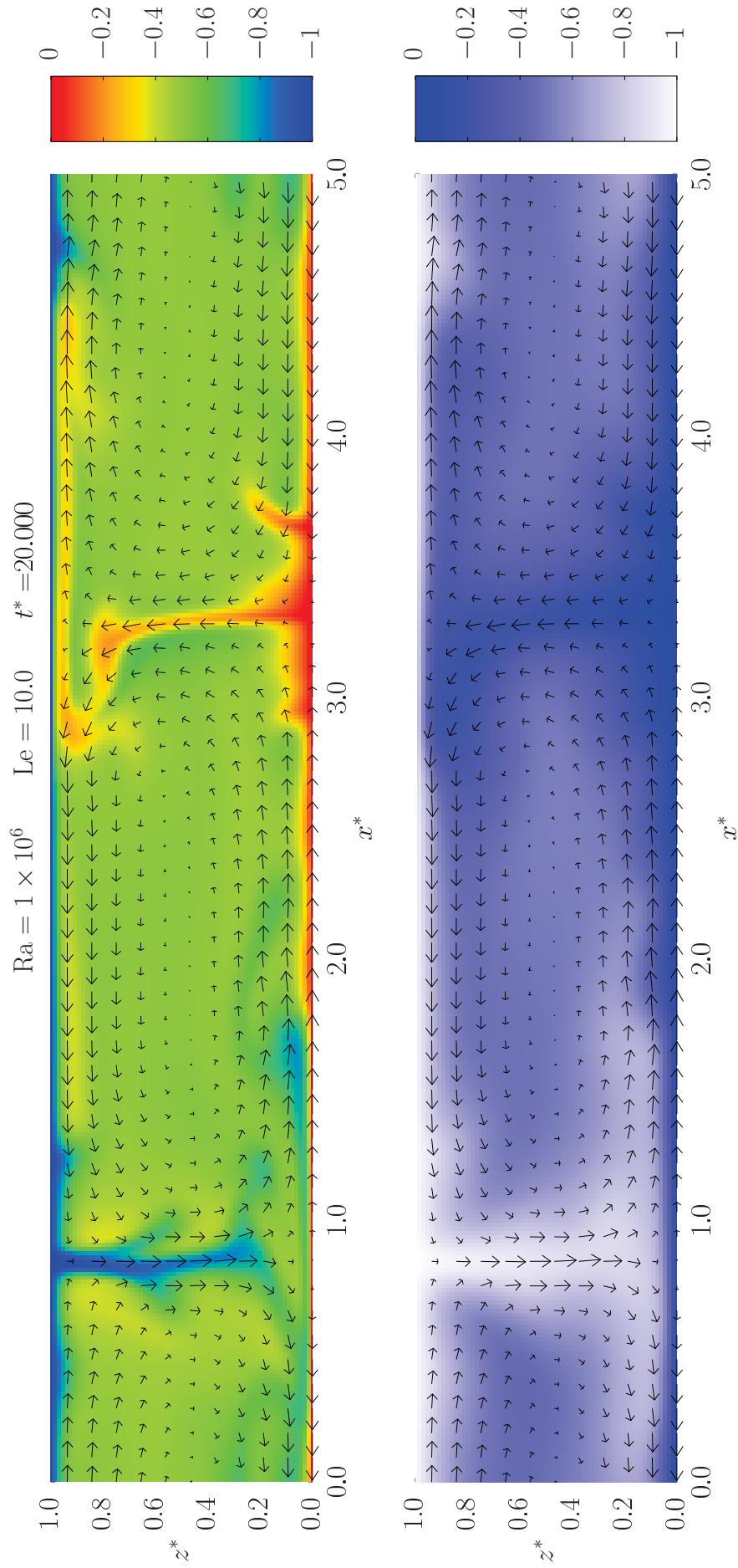


Figura 6.2: Campos de temperatura $\Theta^* - \Theta_0^*$ (acima) e do escalar passivo $Q^* - Q_0^*$ com $Le = 10,0$ (abaixo) determinados via DNS para $Ra = 10^6$.

6.1 Coeficiente de correlação

O coeficiente de correlação de Pearson entre as séries temporais dos escalares, denotado como $\varrho_{\theta q}$, é uma maneira relativamente simples de quantificar a similaridade entre os mesmos. Para dois escalares perfeitamente idênticos, por exemplo, tem-se $\varrho_{\theta q} = 1$. Por outro lado, uma correlação unitária (em módulo) implica na existência de uma relação perfeitamente linear entre os mesmos (Navidi, 2015, p. 512). Consequentemente, o mesmo vale para suas médias, pois

$$\begin{aligned} |\varrho_{\theta q}| = 1 &\Rightarrow Q = c_1 \Theta + c_2, \\ \langle Q \rangle &= c_1 \langle \Theta \rangle + c_2. \end{aligned}$$

Aplicando a decomposição de Reynolds e subtraindo a equação para a média do resultado, obtém-se uma equação para as flutuações,

$$q = c_1 \theta \Rightarrow \langle wq \rangle = c_1 \langle w\theta \rangle.$$

Logo, correlação (ou anti-correlação) perfeita entre escalares implica em suas flutuações serem proporcionais entre si, um resultado que também foi obtido por Hill (1989). Outra consequência é que a razão entre os fluxos turbulentos dos escalares é constante (e igual a c_1 na notação utilizada).

Derivando a relação linear entre as médias dos escalares em relação a z , encontra-se

$$\frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial z} = c_1 \frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial z},$$

ou seja, a razão entre os gradientes médios dos escalares também é igual à constante c_1 . Usando a definição da difusividade turbulenta dada na seção 3.5.1,

$$K_q = -\langle wq \rangle \left(\frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial z} \right)^{-1} = -c_1 \langle w\theta \rangle \left(c_1 \frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial z} \right)^{-1} = -\langle w\theta \rangle \left(\frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial z} \right)^{-1} = K_\theta.$$

Portanto, correlação entre escalares unitária (em módulo) implica em suas difusividades turbulentas serem idênticas. Ressalta-se que este resultado é verdadeiro mesmo em casos em que a difusividade turbulenta não é uma boa opção de modelagem.

A média do coeficiente de correlação entre as séries temporais (obtidas via DNS) de Θ'^* e Q'^* na seção $z^* = 1/2$ em função de Le é apresentado para diferentes valores de Ra na figura 6.3. Quando o número de Lewis é unitário, os escalares possuem difusividades moleculares idênticas, e verificou-se que, após partirem de condições iniciais distintas, suas séries temporais também tornam-se idênticas após um curto período transiente. Por outro lado, $\varrho_{\theta q}$ cai rapidamente conforme o número de Lewis se afasta da unidade, um resultado que indica que difusividades moleculares diferentes são uma fonte de dissimilaridade entre escalares.

Conforme Ra (e, portanto, Re) aumenta, o escoamento torna-se progressivamente mais turbulento, e a importância relativa da difusão molecular sobre o transporte dos escalares é reduzida. Consequentemente, o efeito do número de Lewis sobre a correlação entre os mesmos diminui. O número de Péclet, definido na equação (3.38), é uma medida da importância relativa dos transportes turbulento e molecular de um único escalar. Com o objetivo de medir a importância da diferença entre as difusividades moleculares de dois escalares, define-se a quantidade

$$Pe_{\Delta\theta q} \equiv \frac{RePr}{10^{|\log Le|}}, \quad (6.1)$$

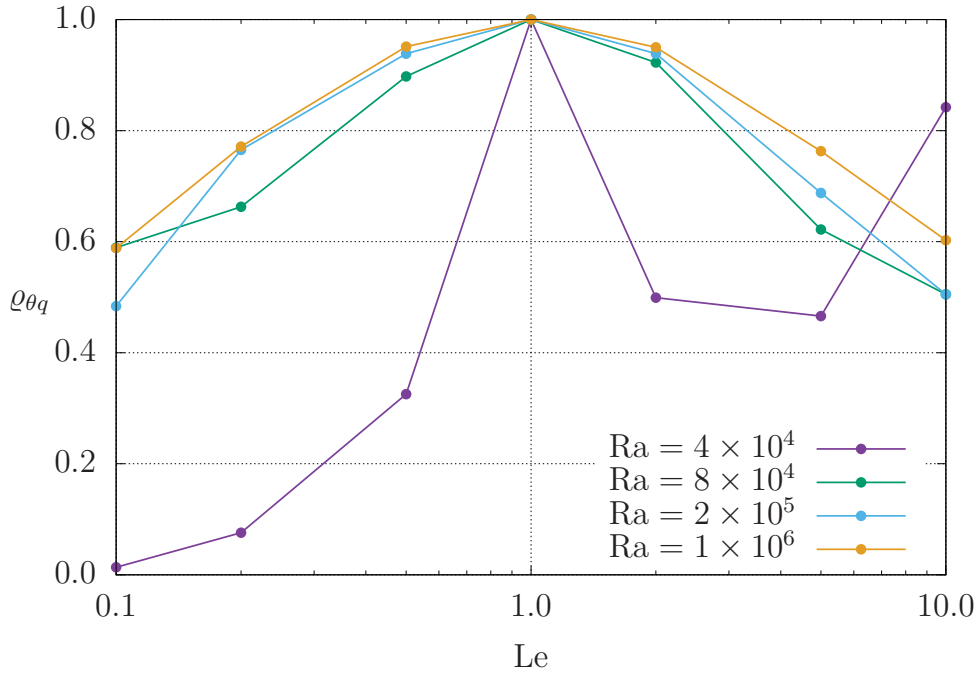


Figura 6.3: Média dos coeficientes de correlação entre as séries temporais (obtidas via DNS) de Θ'^* e Q'^* na seção $z^* = 1/2$ para diferentes números de Lewis e Rayleigh.

que, diferentemente de Pe_q , retorna o mesmo valor para Le e Le^{-1} , sendo portanto simétrico em relação a $Le = 1$ em uma escala logarítmica. Assim, $Pe_{\Delta\theta q}$ mede o transporte molecular diferencial quando Le se afasta da unidade, e o compara com o transporte turbulento dos escalares. Da figura 6.4, percebe-se que a correlação $\rho_{\theta q}$ aumenta conforme $Pe_{\Delta\theta q}$ cresce, seja porque o escoamento possui número de Rayleigh elevado, seja porque as difusividades dos escalares são próximas. Contudo, a definição de $Pe_{\Delta\theta q}$ não foi capaz, para os valores de Ra e Le simulados, de colapsar os valores de $\rho_{\theta q}$ em uma única curva.

Ademais, destaca-se que, para Ra elevado, a curva $\rho_{\theta q}(\log Le)$ apresentada na figura 6.3 é simétrica em relação a $Le = 1$. Em outras palavras, não importa qual é o escalar com maior difusividade molecular: por exemplo, $\rho_{\theta q}$ possui o mesmo valor se $\kappa = 2\alpha$ ou se $\alpha = 2\kappa$. Contudo, isso não se verifica para Ra baixo, situação em que há uma importante assimetria na curva $\rho_{\theta q}(\log Le)$. É possível que tal assimetria seja decorrente do fato da temperatura ser um escalar ativo em RBC, ao contrário de Q , de forma que os escalares possuem “papéis” diferentes no escoamento.

Finalmente, a figura 6.5 apresenta a variação em x^* do coeficiente de correlação entre os escalares. Nota-se que, apesar de ser praticamente uniforme em x^* para números de Rayleigh elevados, este coeficiente varia consideravelmente para valores baixos de Ra , razão pela qual decidiu-se analisar seu valor médio nesta direção. Embora a variação de $\rho_{\theta q}$ em z^* não tenha sido verificada, supõe-se que as condições de contorno possivelmente fazem com que tal coeficiente aumente próximo às placas. Por outro lado, seu valor é indefinido sobre as placas, onde as variáveis do escoamento têm variância nula.

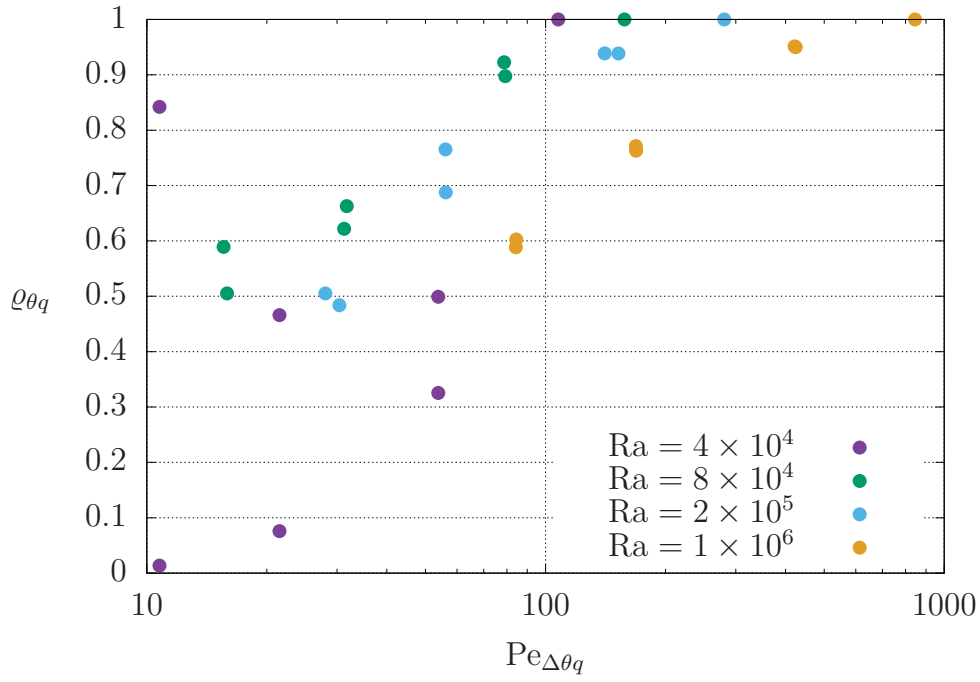


Figura 6.4: Coeficiente de correlação entre os escalares em função do número de Péclet da diferença entre os mesmos, definido em (6.1).

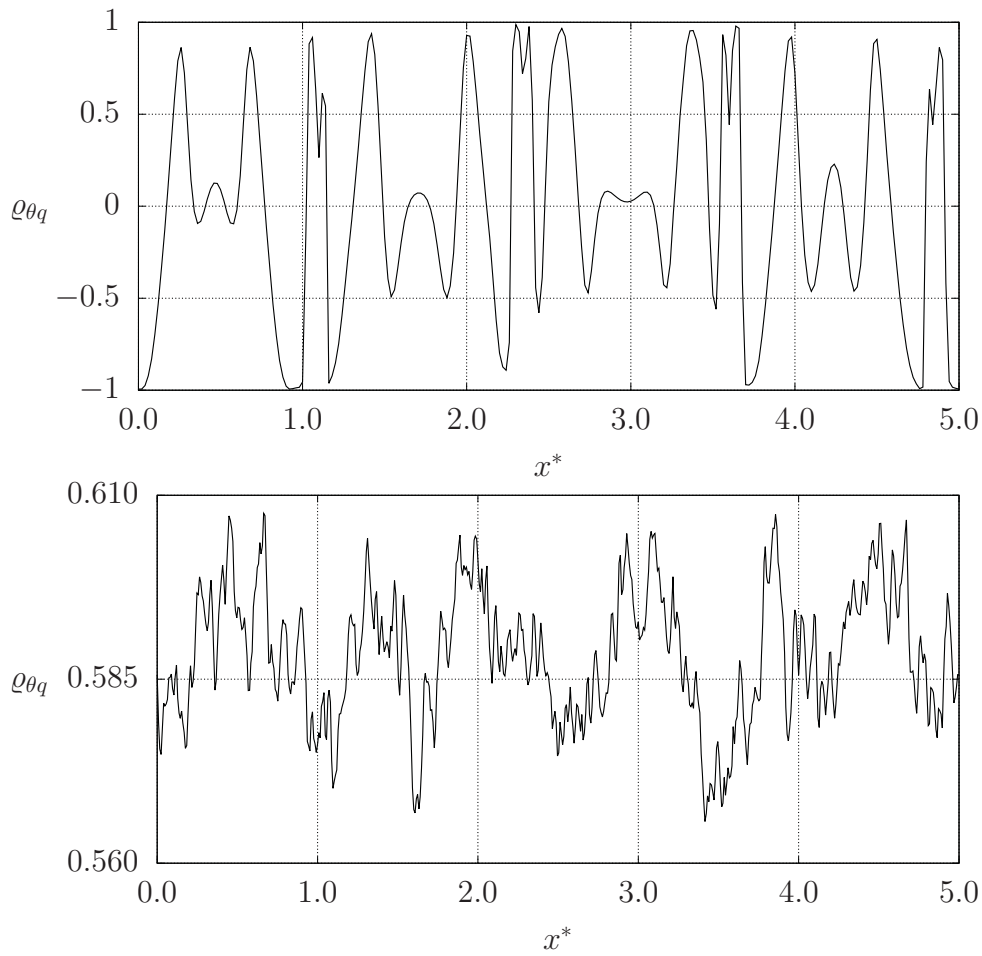


Figura 6.5: Coeficiente de correlação entre as séries temporais dos escalares ao longo da seção $z^* = 1/2$ para $Ra = 4 \times 10^4$ e $Ra = 1 \times 10^6$, respectivamente, e $Le = 0,1$.

6.2 Difusividade turbulenta

Uma outra maneira de avaliar a similaridade entre escalares é através das suas difusividades turbulentas. Primeiramente, utilizou-se a definição dada na equação (3.69), segundo a qual os fluxos turbulentos são proporcionais aos gradientes médios locais (avaliados pontualmente), e os coeficientes K_θ e K_q foram calculados como médias temporais, separadamente para cada valor de x^* na seção $x^* = 1/2$. Em seguida, foram obtidas as médias de tais coeficientes em x^* , as quais estão apresentadas na figura 6.6 para diferentes números de Rayleigh e Lewis.

Não percebeu-se nenhuma tendência geral no comportamento de K_θ e K_q em função de Ra e Le . Na realidade, para um mesmo número de Rayleigh, foram obtidos valores bastante distintos para a difusividade turbulenta de calor, e muitas vezes foram calculadas difusividades turbulentas negativas. Tal resultado está relacionado ao fato dos escalares possuírem gradientes verticais muito próximos de zero longe das placas (ver figura 5.10 para um exemplo de perfil vertical de temperatura). Consequentemente, pequenas variações nos valores dos gradientes médios locais obtidos numericamente provocam grandes alterações nos valores calculados de K_θ e K_q ao dividir-se os fluxos turbulentos por tais gradientes. Assim, o modelo da difusividade turbulenta baseado em gradientes locais não se mostrou adequado para RBC. Tal resultado é bem conhecido para escoamentos em que o transporte de propriedades é altamente não-local (Pleim, 2007), como é o caso de RBC, em que as plumas possuem um papel importante neste processo.

Alternativamente, os coeficientes de difusividade turbulenta (desta vez denotados com uma barra) foram calculados a partir dos gradientes médios na direção vertical:

$$\begin{aligned}\langle w\theta \rangle &= -\overline{K_\theta} \left\langle \frac{\partial \langle \Theta \rangle}{\partial z} \right\rangle_z = \overline{K_\theta} \frac{\Delta \Theta}{H}, \\ \langle wq \rangle &= -\overline{K_q} \left\langle \frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial z} \right\rangle_z = \overline{K_q} \frac{\Delta Q}{H}.\end{aligned}$$

Em termos de variáveis adimensionais,

$$\begin{aligned}\langle w^* \theta^* \rangle &= \alpha^{-1} \overline{K_\theta} \equiv \overline{K_\theta}^*, \\ \langle w^* q^* \rangle &= \alpha^{-1} \overline{K_q} \equiv \overline{K_q}^*.\end{aligned}\tag{6.2}$$

Note que as difusividades turbulentas de ambos os escalares foram adimensionalizadas pelo mesmo fator α , a difusividade molecular de calor. Portanto, quando calculados em termos dos gradientes médios em z^* , a razão entre os fluxos turbulentos adimensionais dos escalares é igual à razão entre suas difusividades turbulentas:

$$\frac{\langle w^* q^* \rangle}{\langle w^* \theta^* \rangle} = \frac{\overline{K_q}^*}{\overline{K_\theta}^*}.$$

Foram obtidas as médias de tais fluxos no tempo e em x^* (na seção $z^* = 1/2$). A razão entre eles está apresentada na figura 6.7 em função do coeficiente de correlação entre os escalares. De fato, suas difusividades turbulentas tornam-se progressivamente diferentes conforme $\varrho_{\theta q}$ se afasta da unidade. Tal razão também é apresentada na figura 6.8 em função do número de Lewis. Para $Ra = 4 \times 10^4$, o escoamento é apenas oscilatório, e o escalar passivo possui difusividade turbulenta inferior à do escalar ativo sempre que $Le \neq 1$. Para números de Rayleigh elevados, entretanto, tem-se que o escalar com maior difusividade molecular também possui a maior difusividade turbulenta, um resultado que pode ser resumido como:

$$\begin{aligned}Le > 1 &\Rightarrow \overline{K_q} > \overline{K_\theta}, \\ Le < 1 &\Rightarrow \overline{K_q} < \overline{K_\theta}.\end{aligned}$$

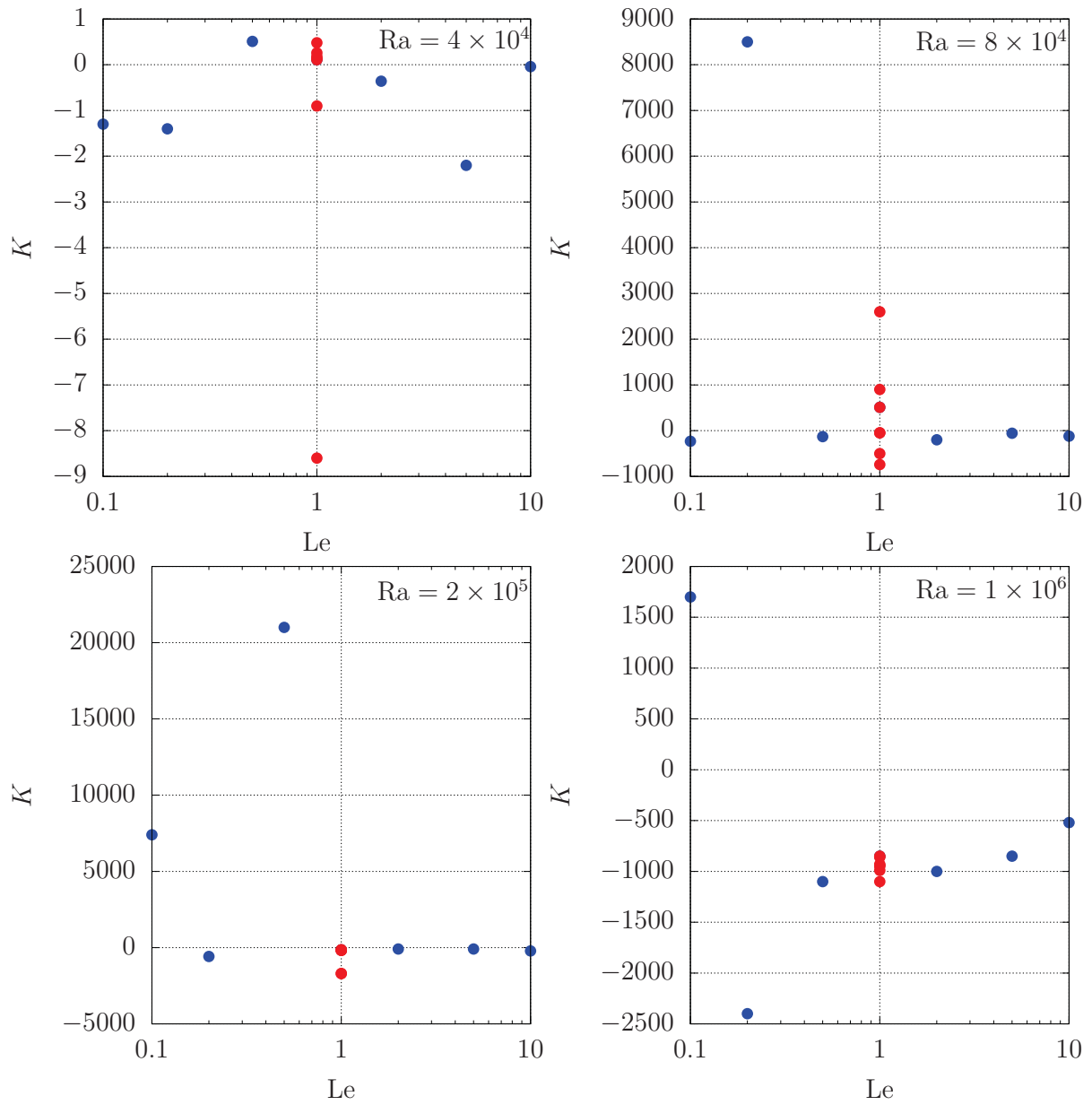


Figura 6.6: Valores médios em x^* na seção $z^* = 1/2$ das difusividades turbulentas de calor K_θ (em vermelho) e do escalar passivo K_q (em azul), calculadas com base nos gradientes locais dos escalares, em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh.

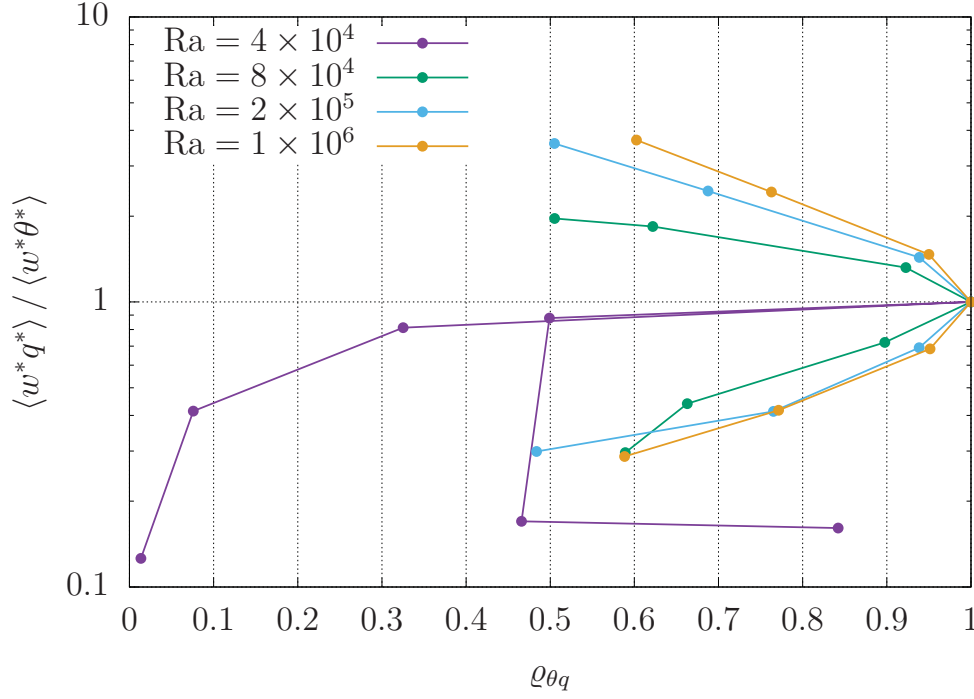


Figura 6.7: Razão entre fluxos turbulentos dos escalares (médios em x^* e em t^*) em função do coeficiente de correlação calculado via DNS para diferentes números de Lewis e Rayleigh.

O número de Lewis do vapor d'água na atmosfera para temperaturas em torno de 20°C é aproximadamente 1,15 (Hickey et al., 2000). O modelo de Warhaft (1976), contudo, prevê que a difusividade turbulenta de calor é superior à difusividade turbulenta de vapor d'água em condições instáveis, o que discorda do nosso resultado. Entretanto, o mesmo modelo prevê o contrário para condições estáveis, nas quais Verma et al. (1978) mediram $K_\theta > K_q$.

Finalmente, destaca-se que a razão entre os fluxos advectivos médios dos escalares, apresentada na figura 6.8, também depende do número de Lewis. Contudo, o termo advectivo na equação média de transporte de um escalar, $\langle W \rangle \langle Q \rangle$, não depende explicitamente de Le : tal dependência está implícita em $\langle Q \rangle$. No caso de RBC, por exemplo, quando Le é elevado, há uma maior concentração do escalar passivo acima da placa inferior disponível para o transporte advectivo. Assim, quando o termo de difusão molecular está presente na equação utilizada para modelar o transporte de um escalar Q , os demais termos são alterados através do próprio campo escalar, mesmo que não dependam explicitamente de sua difusividade molecular κ . Entretanto, quando o termo de difusão molecular é desprezado (por exemplo, ao simular-se um escoamento através de LES ou das equações médias), escalares com diferentes difusividades moleculares passam a ser descritos por equações idênticas. Os resultados apresentados nesta seção indicam que o efeito das difusividades moleculares dos escalares deve ser incorporado ao modelo de alguma maneira quando as mesmas forem muito diferentes, e também quando o número de Reynolds do escoamento não for suficientemente elevado para que tal diferença se torne desprezível.

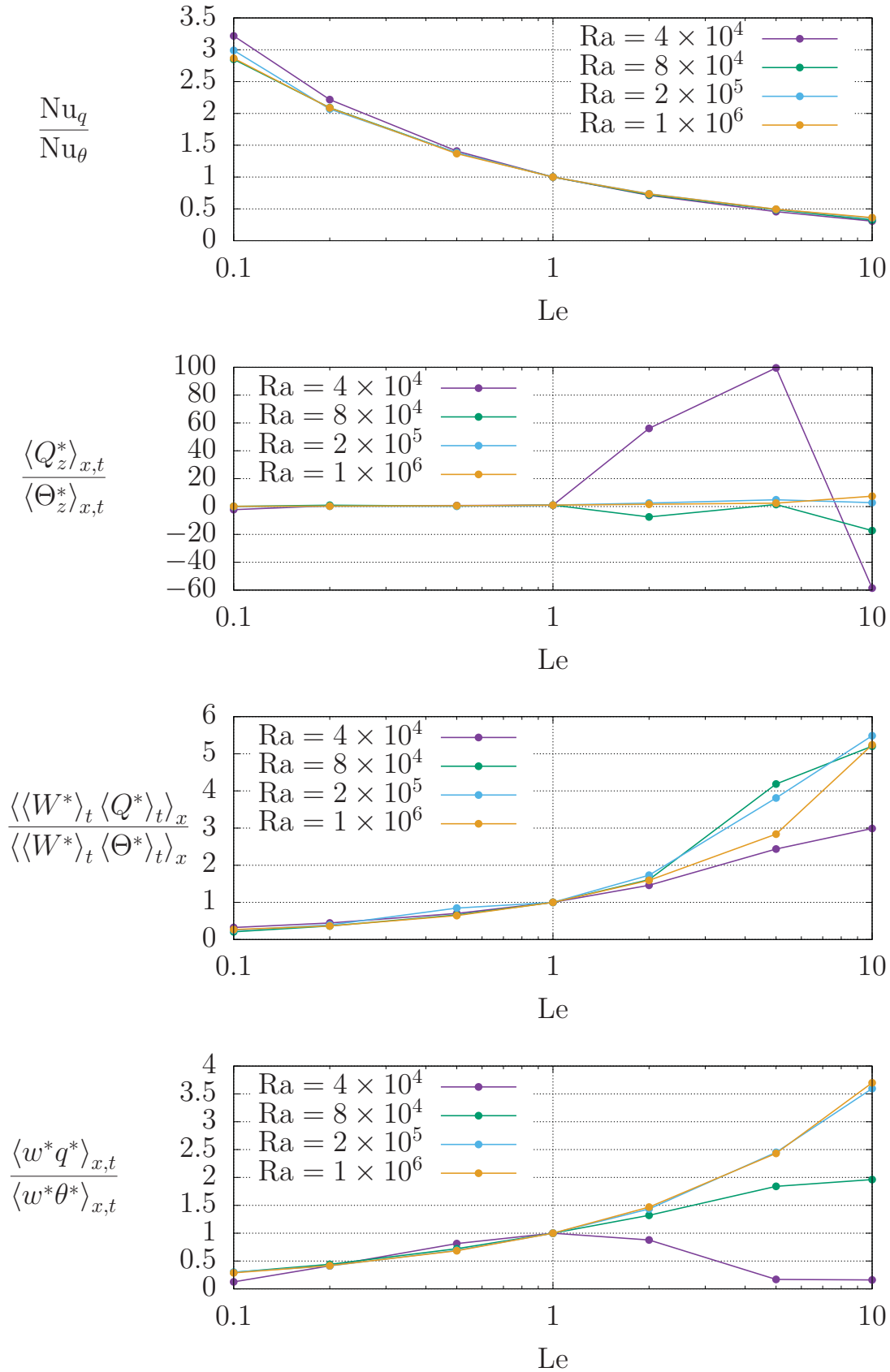


Figura 6.8: Razões entre números de Nusselt, fluxos moleculares, advectivos e turbulentos médios em x^* (na seção $z^* = 1/2$) dos escalares (respectivamente) em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh.

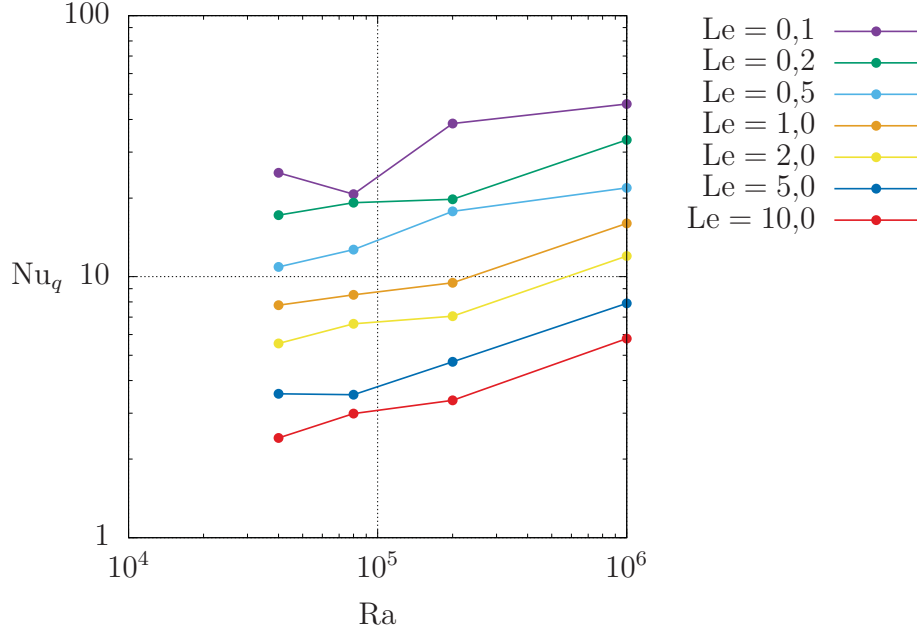


Figura 6.9: Número de Nusselt do escalar passivo em função do número de Rayleigh para diferentes números de Lewis.

6.3 Número de Nusselt

De maneira similar ao que foi feito para Nu_θ na seção 5.2.1, também é possível simplificar a definição de Nu_q aplicando-se a decomposição de Boussinesq:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \wp W Q - \wp \kappa \frac{\partial Q}{\partial z} \right\rangle_{x,t} &= \wp \langle W Q' \rangle_{x,t} + \wp \kappa \Delta Q H^{-1} - \wp \kappa \frac{d\langle Q' \rangle_{x,t}}{dz}, \\
 &= \wp \kappa \Delta Q H^{-1} \left(\frac{\alpha}{\kappa} \langle W^* Q'^* \rangle_{x,t} + 1 - \frac{d\langle Q'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} \right), \\
 \Rightarrow Nu_q &= 1 - \frac{d\langle Q'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} + \frac{1}{Le} \langle W^* Q'^* \rangle_{x,t}. \tag{6.3}
 \end{aligned}$$

No caso do escalar passivo, entretanto, a escolha de H^2/α como escala de tempo fez com que a divisão de $\wp W Q'$ (igual a $\alpha \wp \Delta Q W^* Q'^*/H$) pelo fluxo molecular do escalar passivo na situação estática, $\wp \kappa \Delta Q/H$, fornecesse o fluxo adimensional $W^* Q'^*$ dividido pelo número de Lewis. Assim como ocorre com Nu_θ , Nu_q é uniforme em z^* , o que pode ser provado analiticamente com a equação de conservação do escalar passivo.

Conforme apresentado na figura 6.9, o número de Nusselt do escalar passivo é bastante elevado para Le baixo. Dado que Nu_q mede a eficiência do transporte total de Q em comparação com o transporte difusivo na situação estática, quando Le é baixo, a difusividade molecular do escalar passivo é baixa, e o transporte na situação estática é muito pequeno. Consequentemente, o transporte advectivo é relativamente muito maior, o que faz com que Nu_q seja elevado. Por outro lado, quando Le é elevado, o número de Nusselt é baixo, pois o transporte total do escalar passivo é dividido pelo valor bastante elevado que é o transporte molecular de um escalar de alta difusividade. Isso também pode ser percebido na figura 6.8, considerando que Nu_θ não varia com Le . Em uma próxima etapa deste estudo, tais resultados devem ser comparados com a generalização da teoria GL para RBC com dois escalares ativos de Yang et al. (2018).

6.4 Outras medidas

6.4.1 Coeficientes de correlação espectral

Na figura 6.10, estão apresentadas as funções de coerência e os coeficientes de correlação espectral (definidos nas equações (3.93) e (3.94), respectivamente) das séries temporais dos escalares avaliados no centro do escoamento, para $Ra = 10^6$ e número de Lewis variável. Destaca-se que a diferença entre tais funções, causada pelo espectro de quadratura $Qu_{\theta q}$, é muito pequena. No caso $Le = 1$, não apresentado na figura, $\gamma_{\theta q}^2(n) = \Upsilon_{\theta q}^2(n) = 1 \forall n$. Conforme Le se afasta da unidade, os valores de ambas as funções decrescem.

Nas baixas frequências, as quais são associadas às maiores escalas do escoamento e são as principais responsáveis pelo transporte dos escalares, a correlação entre Q e Θ é maior. De fato, os escalares tornam-se progressivamente mais similares conforme diminui-se n , de maneira que as curvas causam a impressão de tender à unidade conforme $n \rightarrow 0$, como se as macroescalas da turbulência forçassem os escalares a serem similares entre si. Entretanto, conforme as difusividades dos escalares se tornam mais diferentes, as escalas em que é possível observar uma similaridade entre os mesmos tornam-se cada vez maiores. Isto faz com que a parte similar do espectro seja deslocada para frequências progressivamente menores (nem sempre existentes) e, conseqüentemente, que a correlação nas baixas frequências caia. Portanto, se o número de Rayleigh não for suficientemente elevado, as baixas frequências do escoamento podem ser afetadas pela difusividade molecular dos escalares.

Nas altas frequências, associadas às microescalas da velocidade e dos escalares, Q e Θ rapidamente se decorrelacionam devido à importância de suas características moleculares nesta escala. Próximo de $n \approx \tau_u^{*-1}$, entretanto, existe um máximo local nas curvas quando Le está suficientemente afastado da unidade.

No final dos espectros, as variâncias de $\gamma_{\theta q}^2(n)$ e $\Upsilon_{\theta q}^2(n)$ são reduzidas, e as curvas atingem valores bastante elevados ou, alternativamente, próximos de zero. Conforme discutido na seção 5.3.1, supõe-se que trata-se de um efeito puramente numérico, não relacionado à física do escoamento.

6.4.2 Espaços de fase

Os espaços de fase obtidos com as séries temporais dos escalares no centro do escoamento para $Ra = 10^6$ são apresentados na figura 6.11 para diferentes números de Lewis. A trajetória no caso $Le = 1$ encontra-se sobre a reta identidade, representada em cinza nas figuras como referência. Conforme o número de Lewis se afasta da unidade, os pontos se afastam de tal reta, adquirindo uma inclinação média menor (maior) que a unidade para $Le < 1$ ($Le > 1$).

Além disso, os espaços de fase sugerem que a relação entre os escalares não é afetada pelo fato de Θ ser ativo e Q ser passivo. Comparando um dado espaço de fase com aquele associado ao número de Lewis inverso (por exemplo, $Le = 10$ e $Le = 0,1$), percebe-se que, aparentemente, um pode ser obtido a partir do outro simplesmente refletindo-se a nuvem de pontos em torno da diagonal principal do sistema de coordenadas, ou seja, trocando as variáveis representadas nos eixos horizontal e vertical.

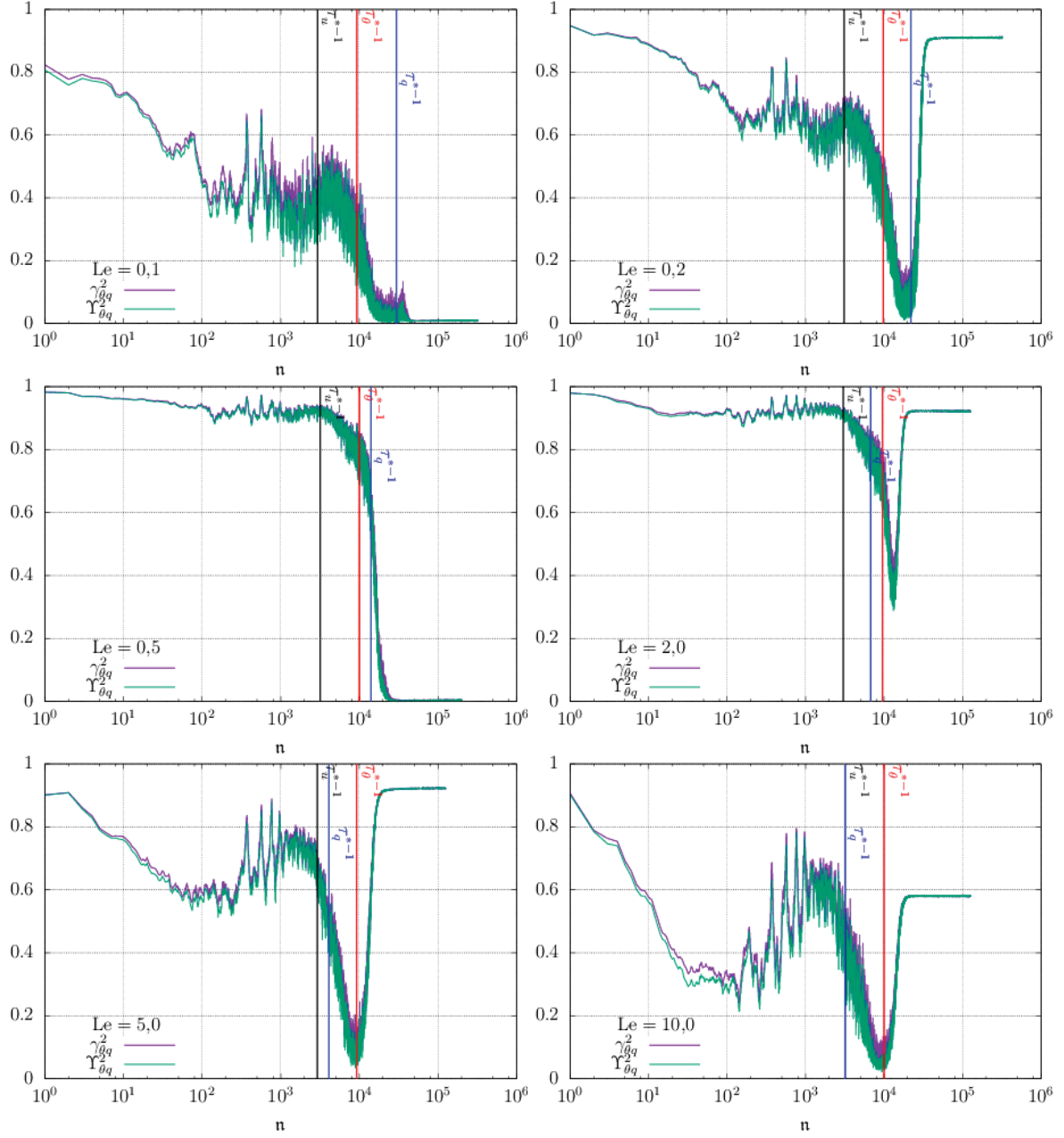


Figura 6.10: Função de coerência $\gamma_{\theta q}^2(n)$ (em roxo) e coeficiente de correlação espectral $\Upsilon_{\theta q}^2(n)$ (em verde) entre os escalares para $Ra = 10^6$ e diferentes números de Lewis. As retas verticais em preto, vermelho e azul indicam respectivamente τ_u^{*-1} , τ_θ^{*-1} e τ_q^{*-1} .

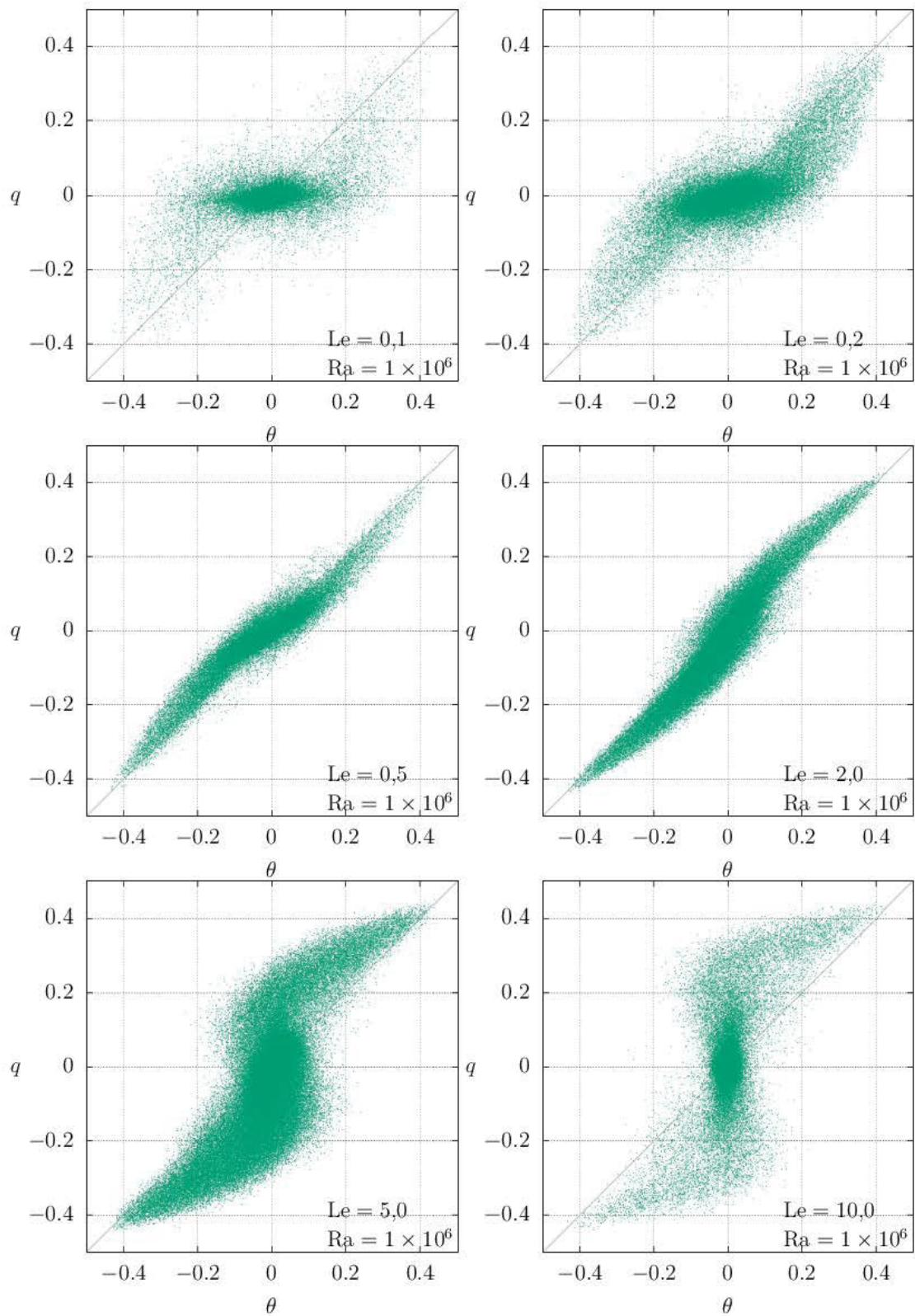


Figura 6.11: Espaço de fase obtidos com as séries temporais dos escalares avaliados no centro do escoamento para $Ra = 10^6$ e Le variável (reta 1 : 1 em cinza).

6.4.3 Funções de autocorrelação

A função de autocorrelação do escalar passivo, calculada como

$$\varrho_{qq}(\Delta x^*) = \langle Q'^*(x^* = \Gamma/2, z^* = 1/2) Q'^*(x^* = \Gamma/2 + \Delta x^*, z^* = 1/2) \rangle_t$$

para $0 \leq \Delta x^* \leq \Gamma/2$, está ilustrada na figura 6.12 para diferentes valores de Le e Ra. Para números de Rayleigh baixos, a periodicidade do escoamento em x^* é bastante evidente em ϱ_{qq} , o que não ocorre para números de Rayleigh elevados, em que ϱ_{qq} é próximo de zero na maior parte de seu domínio para todos os valores de Le.

Já a difusividade molecular está associada à rapidez com que a informação sobre o campo escalar associado é transmitida. Consequentemente, a função de autocorrelação de Q'^* decai mais lentamente quanto maior o número de Lewis. Quando Le é baixo, por outro lado, uma pequena separação é suficiente para fazer com que o escalar passivo se decorrelacione com si mesmo. De fato, para $Ra = 10^6$, as curvas $\varrho_{qq}(\Delta x^*)$ decaem sequencialmente segundo Le.

Uma escala de comprimento integral \mathcal{L}_q associada ao escalar passivo pode ser definida integrando-se a função de autocorrelação de $\Delta x^* = 0$ até a posição em que ϱ_{qq} se anula pela primeira vez. A partir do valor resultante, pode-se obter uma difusividade turbulenta como

$$K_q = \mathcal{U} \mathcal{L}_q$$

(Pope, 2000, p. 107). Visualmente, percebe-se que, para o caso $Ra = 10^6$ ilustrado na figura 6.12, por exemplo, os valores de K_q obtidos através desse método aumentam conforme Le cresce.

6.5 Equações de Lorenz

As séries de Fourier para Q'^* (equação (3.62)) e para W^* (obtida das equações (3.51) e (3.39)) podem ser substituídas na expressão (6.3) para obter Nu_q em função dos coeficientes de Lorenz. Antes disso, entretanto, são determinados os valores médios das equações (3.63) e (3.64), que são adicionadas ao sistema de Lorenz devido à inclusão do escalar passivo em RBC. Supondo que $D(t^*)$ e $E(t^*)$ são estatisticamente estacionários, e usando o fato que $\langle D \rangle = 0$ (verificado numericamente), tais médias são

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle D \rangle = \langle AE \rangle = 0, \\ \langle AD \rangle &= \frac{8Le}{a} \langle E \rangle, \end{aligned}$$

resultados análogos às equações (5.18) e (5.19). Assim, o termo referente ao transporte difusivo fica

$$1 - \frac{d\langle Q'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} = 1 + 2\pi \langle E \rangle \cos(2\pi z^*),$$

e o termo advectivo torna-se

$$\begin{aligned} \langle W^* Q'^* \rangle_{x,t} &= \pi a \langle AD \rangle \langle \cos^2(\pi a x^*) \rangle_x \sin^2(\pi z^*), \\ \langle W^* Q'^* \rangle_{x,t} &= 4\pi Le \langle E \rangle \sin^2(\pi z^*). \end{aligned} \tag{6.4}$$

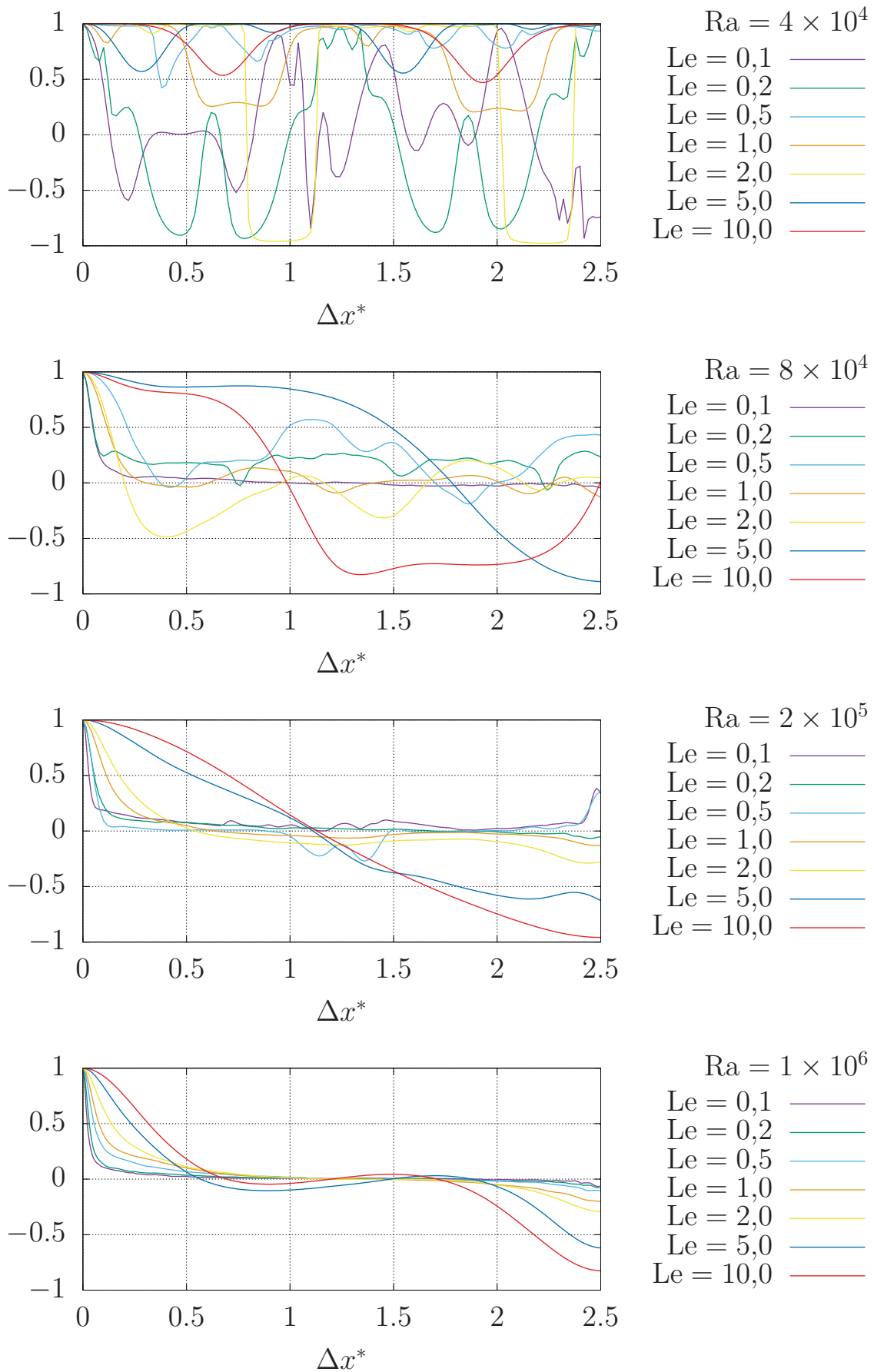


Figura 6.12: Função de autocorrelação do escalar passivo $q_{qq}(\Delta x^*)$ em função de Le para diferentes números de Rayleigh.

Assim,

$$\begin{aligned}
 \text{Nu}_q &= 1 - \frac{d\langle Q'^* \rangle_{x,t}}{dz^*} + \frac{1}{\text{Le}} \langle W^* Q'^* \rangle_{x,t}, \\
 &= 1 + 2\pi \langle E \rangle \cos(2\pi z^*) + 4\pi \langle E \rangle \sin^2(\pi z^*), \\
 &= 1 + 2\pi \langle E \rangle [\cos(2\pi z^*) + 2\sin^2(\pi z^*)], \\
 \text{Nu}_q &= 1 + 2\pi \langle E \rangle,
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

um resultado análogo a (5.21) para Nu_θ . Em uma próxima fase deste estudo, deve-se encontrar uma relação entre $\langle E \rangle$, Ra e Le para que a qualidade da previsão (6.5) seja avaliada.

Foram determinadas as previsões das equações de Lorenz para a correlação entre os escalares, assim como para as razões entre os fluxos advectivos (médios e turbulentos) dos mesmos. Ao longo da seção $z^* = 0,5$, as variâncias e a covariância dos escalares são

$$\langle \theta^* q^* \rangle = \langle BD \rangle \cos^2(\pi a x^*), \quad \langle \theta^{*2} \rangle = \langle B^2 \rangle \cos^2(\pi a x^*), \quad \langle q^{*2} \rangle = \langle D^2 \rangle \cos^2(\pi a x^*),$$

de forma que, para qualquer valor de x^* , o coeficiente de correlação entre θ'^* e Q'^* é igual ao coeficiente de correlação entre B e D .

As curvas da figura 6.13 comparam a correlação entre B e D (em função de Le) com os valores de $\varrho_{\theta q}$ obtidos via DNS. Para $\text{Ra} = 4 \times 10^4$, embora as equações de Lorenz superestimem bastante a correlação entre os escalares, elas preveem que $\varrho_{\theta q}$ volta a aumentar quando $\text{Le} \gtrsim 10$ (não mostrado na figura) e, de fato, os resultados do DNS forneceram $\varrho_{\theta q}$ maior para $\text{Le} = 10$ do que para $\text{Le} = 5$. Para $\text{Ra} = 8 \times 10^4$ e $\text{Ra} = 2 \times 10^5$, os resultados do sistema de Lorenz são surpreendentemente próximos (dada a simplicidade e o baixo custo computacional da implementação do mesmo) dos pontos obtidos através de DNS. Entretanto, conforme aumenta-se Ra , $\varrho_{\theta q}$ torna-se progressivamente simétrico (em uma escala logarítmica) em relação a $\text{Le} = 1$, enquanto a assimetria da curva de correlação entre B e D persiste. De fato, o truncamento das séries de Fourier faz com que os resultados das equações de Lorenz tornem-se menos acurados para números de Rayleigh elevados. Por outro lado, para valores de Le próximos da unidade (como é o caso do vapor d'água na atmosfera), o erro dos resultados calculados através das equações de Lorenz é menor.

Os fluxos advectivos médios calculados através das equações de Lorenz se anulam em qualquer posição do escoamento, pois $\langle W^* \rangle = \pi a \langle A \rangle \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*)$, e $\langle A \rangle = 0$, de forma que a razão entre os mesmos é indefinida. Por outro lado, os fluxos turbulentos são dados pelas equações (5.20) e (6.4), e a previsão das equações de Lorenz para a razão entre eles é, para qualquer posição (x^*, z^*) ,

$$\frac{\langle w^* q^* \rangle_{x,t}}{\langle w^* \theta^* \rangle_{x,t}} = \frac{\overline{K}_q}{\overline{K}_\theta} = \text{Le} \frac{\langle E \rangle}{\langle C \rangle}. \tag{6.6}$$

As razões entre os fluxos turbulentos dos escalares, calculadas através das equações de Lorenz e via DNS, são apresentadas na figura 6.14 em função de $\varrho_{\theta q}$, e na figura 6.15 em função de Le . Assim como verificado (em geral) via DNS, as equações de Lorenz preveem que o escalar com maior difusividade molecular também possui a maior difusividade turbulenta, embora tais equações superestimem (subestimem) \overline{K}_q e $\langle w^* q^* \rangle$ para $\text{Le} > 1$ ($\text{Le} < 1$).

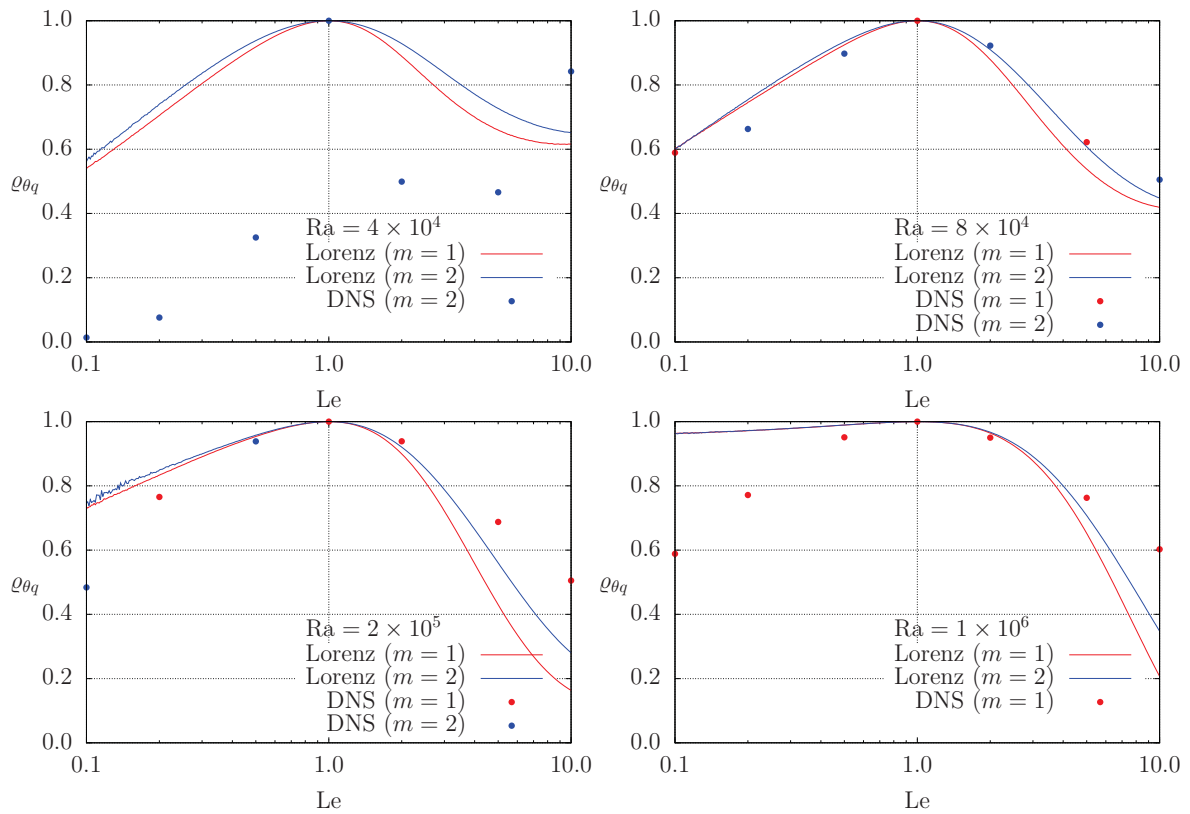


Figura 6.13: Correlação entre escalares prevista pelas equações de Lorenz e valores obtidos via DNS em função do número de Lewis para diferentes números de Rayleigh, separadamente para as duas configurações possíveis do escoamento.

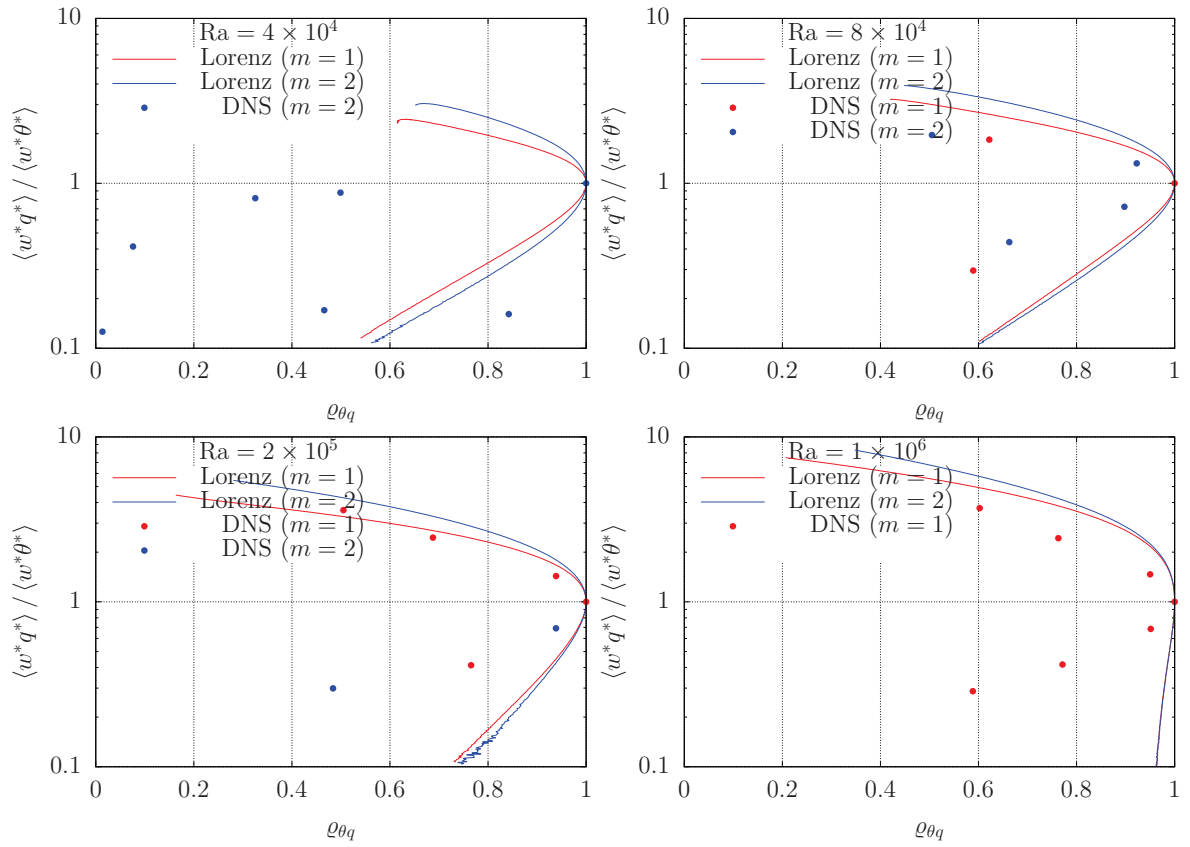


Figura 6.14: Razão entre fluxos turbulentos dos escalares em função do coeficiente de correlação conforme previsto pelas equações de Lorenz, e comparação com valores obtidos via DNS, para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.

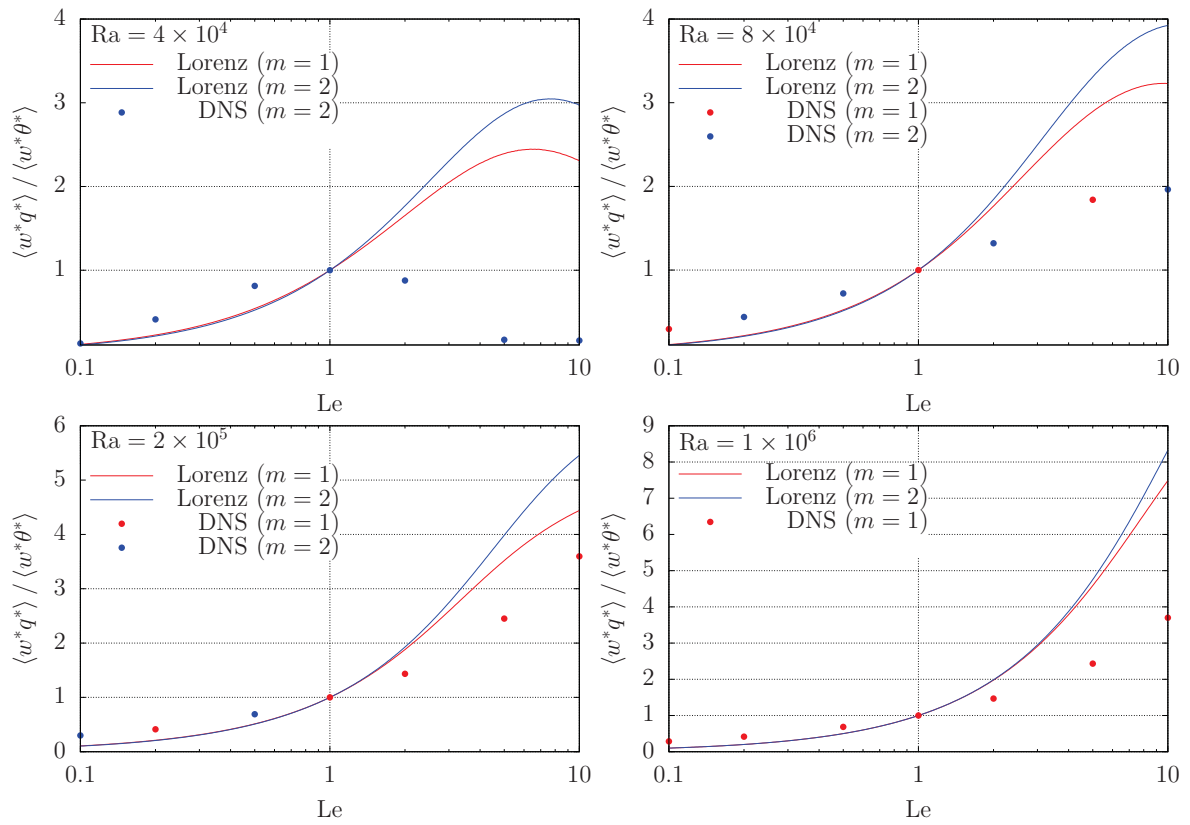


Figura 6.15: Razão entre fluxos turbulentos dos escalares em função de Le conforme previsto pelas equações de Lorenz, e comparação com valores obtidos via DNS, para diferentes números de Rayleigh e configurações do escoamento.

Capítulo 7

Considerações finais e recomendações

Neste estudo, avaliou-se o efeito das difusividades moleculares sobre a similaridade entre dois escalares em RBC bidimensional, um sistema relativamente simples que representa diversos escoamentos que ocorrem em ambientes naturais. Optou-se por uma simulação numérica direta, cujo elevado custo computacional (ilustrado na tabela 4.1) limitou o número de Rayleigh dos escoamentos simulados com uma longa duração a $Ra = 10^7$ (10^6 na presença do escalar passivo de baixa difusividade). Entretanto, tal método permitiu que quaisquer quantidades desejadas fossem obtidas numericamente com elevada acurácia, o que é, na verdade, a razão pela qual o mesmo é considerado como uma ferramenta de pesquisa. Como regra prática, estabeleceu-se que a espessura da malha numérica pode ser igual a cerca de quatro vezes a estimativa teórica da microescala do escalar com menor difusividade (equação (5.17)).

Foram identificados diversos regimes de escoamento conforme varia-se os intervalos em que se situa Ra . Os limites de tais intervalos são bastante próximos daqueles obtidos experimentalmente (Busse, 1978) e via as equações de Lorenz (1963). Conforme Ra cresce, verificou-se que o tamanho das maiores estruturas presentes no escoamento também aumenta, como descrito por Grötzbach (1983) e ilustrado na tabela 5.1. Para $Ra \gtrsim 8 \times 10^4$, ocorre um regime caótico em que foram verificados diversos resultados clássicos em turbulência, tais como $\epsilon_M \ll \epsilon$ (figura 5.35), a homogeneização de propriedades do escoamento (como o perfil vertical de temperatura da figura 5.10), e espectros cuja maior parte da energia é dissipada antes que as frequências associadas às microescalas sejam atingidas (figuras 5.22–5.27). Além disso, os resultados sugerem que, para Ra suficientemente elevado, o sistema torna-se estatisticamente estacionário e homogêneo na direção horizontal (ver, por exemplo, figuras 5.35 e 6.5), de maneira que quaisquer quantidades médias só dependem da coordenada vertical.

Demonstrou-se analiticamente que a média de W em x se anula para qualquer posição vertical z e em qualquer instante de tempo (equação (5.1)). Também demonstrou-se que o número de Nusselt não depende de z (equação (5.4)). As leis de potência obtidas para Nu_θ e Re são ligeiramente diferentes daquelas previstas pela teoria de Grossmann e Lohse (2000), possivelmente devido ao fato do escoamento ser bidimensional, e com condições de contorno de tensão nula em z^* e periódicas em x^* , diferentes do que se tem experimentalmente. Os resultados obtidos via DNS mostraram que as soluções das equações de Lorenz são inapropriadas para se prever tais parâmetros adimensionais. Estas equações fornecem a expressão (5.21), bastante simples, para Nu_θ , que só depende do valor médio $\langle C \rangle$.

Em seguida, analisou-se o comportamento de um escalar passivo com número de Lewis variável no escoamento. Diversos indicadores de similaridade entre escalares apontaram que a difusividade molecular altera o transporte do mesmo quando (i) Le é suficientemente distante da unidade, e (ii) Re não é tão elevado. Como uma medida conjunta da diferença entre as difu-

sividades dos escalares e da intensidade da turbulência do escoamento, propôs-se a definição de um número de Péclet da diferença entre os escalares. Os escalares são similares quando $Pe_{\Delta\theta q}$, definido em (6.1), é elevado. Caso contrário, a correlação entre os mesmos decai, e suas difusividades turbulentas tornam-se distintas, sendo que o escalar com a maior difusividade molecular também apresenta a maior difusividade turbulenta. As funções de coerência entre os escalares indicaram que, conforme $|\log Le|$ cresce, a dissimilaridade alcança frequências cada vez mais baixas. Por outro lado, os resultados sugerem que, quando Le é próximo da unidade (como é o caso do vapor d'água na atmosfera, por exemplo), e o escoamento é suficientemente turbulento, desprezar os fenômenos moleculares não acarreta em uma perda significativa de acurácia na previsão fornecida pelo modelo. Entretanto, vale ressaltar que, mesmo para Re bastante elevado, é possível que processos vinculados às pequenas escalas do escoamento, tais como reações químicas, sejam impactados pelo número de Lewis. Assim, as taxas de reação entre escalares, por exemplo, devem depender de Le , mesmo que as suas covariâncias se mantenham inalteradas.

O fato de Θ e Q possuírem papéis distintos no escoamento (como escalares ativo e passivo) não parece ter afetado a similaridade entre os mesmos. De fato, quando $Le = 1$, tem-se que $\varrho_{\theta q} = 1$, $\overline{K}_{\theta} = \overline{K}_q$ e $\gamma_{\theta q}^2(\mathbf{n}) \equiv 1 \forall \mathbf{n}$. Na realidade, mesmo partindo de condições iniciais distintas, as séries dos escalares se tornam idênticas, após um período transiente, quando $Le = 1$. Além disso, em regime turbulento, todas as quantidades observadas (coeficiente de correlação, função de coerência, espaços de fase, etc.) mostraram-se simétricas em relação a $Le = 1$ em uma escala logarítmica, não importando qual escalar possui a maior difusividade, mas apenas qual é o valor da razão entre tais difusividades. As equações de Lorenz, por outro lado, possuem uma assimetria que persiste mesmo para Ra elevado. Estas equações também fornecem o resultado de que $\langle w^* q^* \rangle > \langle w^* \theta^* \rangle$ quando $Le > 1$ (embora superestimem $\langle w^* q^* \rangle$ neste caso), e $\langle w^* q^* \rangle < \langle w^* \theta^* \rangle$ quando $Le < 1$ (embora subestimem $\langle w^* q^* \rangle$ neste caso).

Os resultados do DNS indicaram que tanto os fluxos advectivos médios quanto os fluxos turbulentos são impactados por fenômenos moleculares quando $Le \gg 1$ ou $Le \ll 1$, um resultado que deve ser levado em consideração por modelos que resolvem as equações médias ou utilizam LES. Entretanto, ainda é necessário verificar se este resultado se mantém em um escoamento tridimensional, de fato turbulento, já que existem fenômenos essencialmente tridimensionais que não ocorrem no problema simulado neste estudo. Também é necessário estudar a sensibilidade dos resultados a outros fatores, tais como Γ , Pr , e as condições iniciais e de contorno. Recomenda-se incluir mais coeficientes nas séries de Fourier das variáveis do escoamento para que seja obtida uma generalização do sistema de Lorenz, cujos resultados serão possivelmente mais acurados para números de Rayleigh maiores.

Além disso, outros métodos numéricos podem ser testados para que o custo computacional seja reduzido e, consequentemente, números de Rayleigh mais elevados possam ser simulados, tornando possível a identificação de possíveis comportamentos assintóticos para $Ra \rightarrow \infty$. Para o avanço no tempo, pode-se utilizar o método de Runge-Kutta de terceira ordem, de maneira que haja uma equação de Poisson a menos para ser resolvida a cada passo de tempo (pois trata-se da etapa mais custosa do método numérico), ou o método de Adams-Bashforth, um método explícito que utiliza valores referentes a vários (e não apenas um) instantes anteriores ao instante em que deseja-se calcular as derivadas (Butcher, 2008, p. 105). Pode-se adaptar o método de resolução da equação de Poisson via FFT para obter-se acurácia de quarta ordem, e também é possível testar métodos de solução iterativa desta equação. Ademais, sugere-se o uso de uma malha de espessura variável, mais fina próximo às placas devido à formação de camadas-limite, algo que é mais simples de ser implementado em diferenças finitas do que em outros métodos. Para isso, é necessário avaliar como a espessura da camada-limite do escalar passivo varia com

Le e os outros parâmetros adimensionais. Finalmente, é possível que, em regime turbulento, as médias temporais possam ser calculadas a partir de séries temporais de duração inferior a $L_t = 20$.

Estudos futuros devem identificar a inclinação dos espectros de velocidade e dos escalares em diferentes faixas de frequência, e determinar se a porção final dos mesmos (após as frequências associadas às microescalas) corresponde a um regime localmente laminar, ou se a sua inclinação é decorrente do método numérico utilizado. Outras escalas de velocidade \mathcal{U}^* (por exemplo, $\langle W^* \rangle_{x,z,t}$) devem ser testadas para verificar-se a lei de potência entre a taxa de dissipação da energia cinética (talvez utilizando apenas ε^* , sem incluir ϵ_M^*) e o cubo desta macroescala. Finalmente, para avaliar a similaridade entre os escalares, também devem ser calculadas medidas de eficiência de transferência relativa (Cancelli et al., 2012), e as medidas baseadas em análise de quadrantes de Li e Bou-Zeid (2011).

Capítulo 8

Referências Bibliográficas

- Ahlers, G., Grossmann, S., e Lohse, D. (2009). Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Reviews of Modern Physics*, 81(2):503–537.
- Amati, G., Koal, K., Massaioli, F., Sreenivasan, K. R., e Verzicco, R. (2005). Turbulent thermal convection at high Rayleigh numbers for a Boussinesq fluid of constant Prandtl number. *Physics of Fluids*, 17(12):121701.
- Araujo, F. F., Grossmann, S., e Lohse, D. (2005). Wind reversals in turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Physical Review Letters*, 95(8):084502.
- Athreya, K. B. e Lahiri, S. N. (2006). *Measure Theory and Probability Theory*. Springer Science & Business Media.
- Baird, C. e Cann, M. (2012). *Environmental Chemistry*. W. H. Freeman and Company, 5ª edição.
- Balachandar, S., Maxey, M. R., e Sirovich, L. (1989). Numerical simulation of high Rayleigh number convection. *Journal of Scientific Computing*, 4(2):219–236.
- Barkas, S. N. (2005). An introduction to fast Poisson solvers. *Philips Journal Research*, 37(5-6):231–264.
- Batchelor, G. K. (1959). Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. Part 1. General discussion and the case of small conductivity. *Journal of Fluid Mechanics*, 5(1):113–133.
- Batchelor, G. K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.
- Batchelor, G. K., Howells, I. D., e Townsend, A. A. (1959). Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. Part 2. The case of large conductivity. *Journal of Fluid Mechanics*, 5(1):134–139.
- Bénard, H. (1900). Étude expérimentale des courants de convection dans une nappe liquide. — Régime permanent: tourbillons cellulaires. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 9(1):513–524.
- Bénard, H. (1901). Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. — Méthodes optiques d’observation et d’enregistrement. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 10(1):254–266.

-
- Bendat, J. S. e Piersol, A. G. (2010). *Random Data: Analysis and Measurement Procedures*. John Wiley & Sons, 4^a edição.
- Benzi, R., Toschi, F., e Tripiccone, R. (1998). On the heat transfer in Rayleigh–Bénard systems. *Journal of Statistical Physics*, 93(3-4):901–918.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., e Lightfoot, E. N. (2002). *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, 2^a edição.
- Borgnakke, C. e Sonntag, R. E. (2009). *Fundamentals of Thermodynamics*. John Wiley & Sons, 7^a edição.
- Briley, W. R. (1971). A numerical study of laminar separation bubbles using the Navier-Stokes equations. *Journal of Fluid Mechanics*, 47(4):713–736.
- Brost, R. A., Delany, A. C., e Huebert, B. J. (1988). Numerical modeling of concentrations and fluxes of HNO_3 , NH_3 , and NH_4NO_3 near the surface. *Journal of Geophysical Research*, 93(D6):7137–7152.
- Brutsaert, W. (1982). *Evaporation into the Atmosphere: Theory, History and Applications*, volume 1. Springer Science & Business Media.
- Busse, F. H. (1978). Non-linear properties of thermal convection. *Reports on Progress in Physics*, 41(12):1929–1967.
- Butcher, J. C. (2008). *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, 2^a edição.
- Cancelli, D. M., Dias, N. L. d. C., e Chamecki, M. (2012). Dimensionless criteria for the production-dissipation equilibrium of scalar fluctuations and their implications for scalar similarity. *Water Resources Research*, 48(10):W10522.
- Celani, A., Matsumoto, T., Mazzino, A., e Vergassola, M. (2002). Scaling and universality in turbulent convection. *Physical Review Letters*, 88(5):054503.
- Celani, A., Mazzino, A., e Vergassola, M. (2001). Thermal plume turbulence. *Physics of Fluids*, 13(7):2133–2135.
- Chandrasekhar, S. (1970). *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Dover publications.
- Chen, Z.-M. e Price, W. G. (2006). On the relation between Rayleigh–Bénard convection and Lorenz system. *Chaos, Solitons & Fractals*, 28(2):571–578.
- Chillà, F. e Schumacher, J. (2012). New perspectives in turbulent Rayleigh–Bénard convection. *The European Physical Journal E*, 35(58):1–25.
- Choi, H. e Moin, P. (1994). Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow. *Journal of Computational Physics*, 113(1):1–4.
- Cooley, J. W. e Tukey, J. W. (1965). An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of Computation*, 19(90):297–301.
- Corrsin, S. (1951). On the spectrum of isotropic temperature fluctuations in an isotropic turbulence. *Journal of Applied Physics*, 22(4):469–473.

- Cussler, E. L. (2009). *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press, 3ª edição.
- Daly, B. J. (1974). A numerical study of turbulence transitions in convective flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(1):129–165.
- Danforth, C. A. (2001). Why the weather is unpredictable, an experimental and theoretical study of the Lorenz equations.
- Davidson, P. A. (2004). *Turbulence: an Introduction for Scientists and Engineers*. Oxford University Press.
- Davidson, P. A., Kaneda, Y., Moffatt, K., e Sreenivasan, K. R. (2011). *A Voyage Through Turbulence*. Cambridge University Press.
- Deardorff, J. W. e Willis, G. E. (1985). Further results from a laboratory model of the convective planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 32(3):205–236.
- DeLuca, E. E., Werne, J., Rosner, R., e Cattaneo, F. (1990). Numerical simulations of soft and hard turbulence: preliminary results for two-dimensional convection. *Physical Review Letters*, 64(20):2370.
- Dias, N. L. d. C. (2013). Research on atmospheric turbulence by Wilfried Brutsaert and collaborators. *Water Resources Research*, 49(11):7169–7184.
- Dias, N. L. d. C. (2017). Smoothed spectra, ogives, and error estimates for atmospheric turbulence data. *Boundary-Layer Meteorology*, 166(1):1–29.
- Dias, N. L. d. C. e Brutsaert, W. (1996). Similarity of scalars under stable conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, 80(4):355–373.
- Freire, L. S., Dias, N. L. d. C., e Grion, A. L. (2018). Uma comparação dos erros de estimativa da taxa de dissipação de energia cinética da turbulência por diferentes métodos na camada-limite atmosférica. *Ciência e Natura*, 40:07–13.
- Getling, A. V. (1998). *Rayleigh-Bénard Convection: Structures and Dynamics*, volume 11. World Scientific.
- Gluckman, B. J., Willaime, H., e Gollub, J. P. (1993). Geometry of isothermal and isoconcentration surfaces in thermal turbulence. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 5(3):647–661.
- Greenberg, M. D. (2013). *Foundations of Applied Mathematics*. Dover publications.
- Grossmann, S. e Lohse, D. (2000). Scaling in thermal convection: a unifying theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 407:27–56.
- Grötzbach, G. (1983). Spatial resolution requirements for direct numerical simulation of the Rayleigh-Bénard convection. *Journal of Computational Physics*, 49(2):241–264.
- Hepworth, B. J. (2014). *Nonlinear two-dimensional Rayleigh-Bénard convection*. Tese de Doutorado, University of Leeds.
- Hermanns, M. (2002). Parallel Programming in Fortran 95 using OpenMP. *Universidad Politécnica de Madrid, Spain*.

-
- Hickey, C. J., Raspet, R., e Slaton, W. V. (2000). Effects of thermal diffusion on sound attenuation in evaporating and condensing gas-vapor mixtures in tubes. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 107(3):1126–1130.
- Hill, R. J. (1989). Implications of Monin-Obukhov similarity theory for scalar quantities. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 46(14):2236–2244.
- Horn, R. A. e Johnson, C. R. (1991). *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge University Press.
- Juneja, A. e Pope, S. B. (1996). A DNS study of turbulent mixing of two passive scalars. *Physics of Fluids*, 8(8):2161–2184.
- Katul, G. e Liu, H. (2017). A Kolmogorov-Brutsaert structure function model for evaporation into a turbulent atmosphere. *Water Resources Research*, 53(5):3635–3644.
- Kerr, R. M. (1996). Rayleigh number scaling in numerical convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 310:139–179.
- Kim, J., Moin, P., e Moser, R. (1987). Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of fluid mechanics*, 177:133–166.
- Kolmogorov, A. N. (1941). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 30(4):299–303.
- Kraichnan, R. H. (1967). Inertial ranges in two-dimensional turbulence. *The Physics of Fluids*, 10(7):1417–1423.
- Kundu, P. K., Cohen, I. M., e Dowling, D. R. (2016). *Fluid Mechanics*. Academic Press, 6ª edição.
- Lee, M. e Moser, R. D. (2015). Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau \approx 5200$. *Journal of Fluid Mechanics*, 774:395–415.
- Lele, S. K. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1):16–42.
- Lesieur, M. (2008). *Turbulence in Fluids*, volume 84. Springer, 4ª edição.
- Li, D. e Bou-Zeid, E. (2011). Coherent structures and the dissimilarity of turbulent transport of momentum and scalars in the unstable atmospheric surface layer. *Boundary-layer meteorology*, 140(2):243–262.
- Liu, J.-G., Wang, C., e Johnston, H. (2003). A fourth order scheme for incompressible Boussinesq equations. *Journal of Scientific Computing*, 18(2):253–285.
- Lohse, D. e Xia, K.-Q. (2010). Small-scale properties of turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42:335–364.
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 20(2):130–141.
- Massman, W. J. (1998). A review of the molecular diffusivities of H₂O, CO₂, CH₄, CO, O₃, SO₂, NH₃, N₂O, NO, and NO₂ in air, O₂ and N₂ near STP. *Atmospheric Environment*, 32(6):1111–1127.

- Moin, P. e Mahesh, K. (1998). Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1):539–578.
- Moser, R. D., Kim, J., e Mansour, N. N. (1999). Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$. *Physics of Fluids*, 11(4):943–945.
- Moser, R. D. e Moin, P. (1987). The effects of curvature in wall-bounded turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 175:479–510.
- Motter, A. E. e Campbell, D. K. (2013). Chaos at fifty. *Physics Today*, 66(5):27–33.
- Navidi, W. C. (2015). *Statistics for Engineers and Scientists*. McGraw-Hill Education, 4ª edição.
- Navon, I. M. (1987). PENT: A periodic pentadiagonal systems solver. *Communications in Applied Numerical Methods*, 3(1):63–69.
- Obukhov, A. M. (1949). Structure of the temperature field in turbulent flow. *Izvestiia Akademii Nauk SSSR, Seriya Geografija i Geofizica*, 13(1):58–69.
- Orszag, S. A. e Patterson Jr., G. S. (1972). Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters*, 28(2):76–79.
- Paul, S., Mishra, P. K., Verma, M. K., e Kumar, K. (2009). Order and chaos in two-dimensional Rayleigh-Bénard convection. *arXiv preprint arXiv:0904.2917*.
- Pearson, J. R. A. (1958). On convection cells induced by surface tension. *Journal of Fluid Mechanics*, 4(5):489–500.
- Pleim, J. E. (2007). A combined local and nonlocal closure model for the atmospheric boundary layer. Part I: Model description and testing. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 46(9):1383–1395.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., e Flannery, B. P. (2007). *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*, volume 1. Cambridge University Press, 3ª edição.
- Pritchard, P. J. (2011). *Fox and McDonald's Introduction to Fluid Mechanics*. John Wiley & Sons, 8ª edição.
- Randall, J. L. (1992). *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, 2ª edição.
- Rayleigh, L. (1916). LIX. On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 32(192):529–546.
- Rodakoviski, R. B. (2016). Análise da correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard por meio das equações de Lorenz.
- Rodakoviski, R. B. e Dias, N. L. (2018). Statistical Description of Rayleigh-Bénard Convection Using the Lorenz Equations. *American Journal of Environmental Engineering*, 8(4):75–87.
- Rogallo, R. S. (1981). Numerical experiments in homogeneous turbulence. Technical Memorandum 81315, NASA.

-
- Saltzman, B. (1962). Finite amplitude free convection as an initial value problem — I. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 19(4):329–341.
- Sarkar, S., Erlebacher, G., Hussaini, M. Y., e Kreiss, H. O. (1991). The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 227:473–493.
- Schlatter, P. e Örlü, R. (2010). Assessment of direct numerical simulation data of turbulent boundary layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 659:116–126.
- Schmalzl, J., Breuer, M., e Hansen, U. (2004). On the validity of two-dimensional numerical approaches to time-dependent thermal convection. *EPL (Europhysics Letters)*, 67(3):390.
- Shishkina, O., Stevens, R. J. A. M., Grossmann, S., e Lohse, D. (2010). Boundary layer structure in turbulent thermal convection and its consequences for the required numerical resolution. *New Journal of Physics*, 12(7):1–17.
- Shraiman, B. I. e Siggia, E. D. (1990). Heat transport in high-Rayleigh-number convection. *Physical Review A*, 42(6):3650.
- Smith, G. D. (1985). *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Oxford University Press, 3ª edição.
- Spalart, P. R. (1988). Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $R_\theta = 1410$. *Journal of Fluid Mechanics*, 187:61–98.
- Stevens, R. J. A. M., Verzicco, R., e Lohse, D. (2010). Radial boundary layer structure and Nusselt number in Rayleigh–Bénard convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 643:495–507.
- Strikwerda, J. C. (2004). *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2ª edição.
- Stringano, G. e Verzicco, R. (2006). Mean flow structure in thermal convection in a cylindrical cell of aspect ratio one half. *Journal of Fluid Mechanics*, 548:1–16.
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers.
- Swarztrauber, P. N. (1984). FFT algorithms for vector computers. *Parallel Computing*, 1(1):45–63.
- Van Loan, C. (1992). *Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Verma, M. K., Mishra, P., Chandra, M., e Paul, S. (2011). Energy Spectra in Rayleigh–Bénard Convection. Em *Journal of Physics: Conference Series*, volume 318, página 082014. IOP Publishing.
- Verma, S. B., Rosenberg, N. J., e Blad, B. L. (1978). Turbulent exchange coefficients for sensible heat and water vapor under advective conditions. *Journal of Applied Meteorology*, 17(3):330–338.
- Versteeg, H. K. e Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: the Finite Volume Method*. Pearson Education, 2ª edição.

- Verzicco, R. e Camussi, R. (1999). Prandtl number effects in convective turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 383:55–73.
- Wang, C. e Liu, J.-G. (2002). Analysis of finite difference schemes for unsteady Navier-Stokes equations in vorticity formulation. *Numerische Mathematik*, 91(3):543–576.
- Wang, C., Liu, J.-G., e Johnston, H. (2004). Analysis of a fourth order finite difference method for the incompressible Boussinesq equations. *Numerische Mathematik*, 97(3):555–594.
- Warhaft, Z. (1976). Heat and moisture flux in the stratified boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 102(433):703–707.
- Weinan, E. e Liu, J.-G. (1996a). Essentially compact schemes for unsteady viscous incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 126(1):122–138.
- Weinan, E. e Liu, J.-G. (1996b). Vorticity boundary condition and related issues for finite difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 124(2):368–382.
- Willis, G. E., Deardorff, J. W., e Somerville, R. C. J. (1972). Roll-diameter dependence in Rayleigh convection and its effect upon the heat flux. *Journal of Fluid Mechanics*, 54(2):351–367.
- Wu, X. e Moin, P. (2008). A direct numerical simulation study on the mean velocity characteristics in turbulent pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 608:81–112.
- Yang, Y., Verzicco, R., e Lohse, D. (2018). Two-scalar turbulent Rayleigh–Bénard convection: numerical simulations and unifying theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 848:648–659.
- Yeung, P. K. e Pope, S. B. (1989). Lagrangian statistics from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 207:531–586.
- Zhou, Q., Liu, B.-F., Li, C.-M., e Zhong, B.-C. (2012). Aspect ratio dependence of heat transport by turbulent Rayleigh–Bénard convection in rectangular cells. *Journal of Fluid Mechanics*, 710:260–276.
- Zhou, Q. e Xia, K.-Q. (2008). Comparative experimental study of local mixing of active and passive scalars in turbulent thermal convection. *Physical Review E*, 77(5):056312.